



Titre: Modélisation numérique de la gazéification de la biomasse dans un réacteur à lit fluidisé
Title:

Auteur: Joël Lavoie
Author:

Date: 2009

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Lavoie, J. (2009). Modélisation numérique de la gazéification de la biomasse dans un réacteur à lit fluidisé [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/8472/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/8472/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Unspecified
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION NUMÉRIQUE
DE LA GAZÉIFICATION DE LA BIOMASSE
DANS UN RÉACTEUR À LIT FLUIDISÉ

JOËL LAVOIE
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)
AOÛT 2009



Library and Archives
Canada

Published Heritage
Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Direction du
Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file *Votre référence*
ISBN: 978-0-494-57254-2
Our file *Notre référence*
ISBN: 978-0-494-57254-2

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION NUMÉRIQUE
DE LA GAZÉIFICATION DE LA BIOMASSE
DANS UN RÉACTEUR À LIT FLUIDISÉ

présenté par : LAVOIE Joël

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. FRADETTE Louis, Ph.D., président

M. CHAOUKI Jamal, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. HENICHE Mourad, Doct., membre

Remerciements

Les travaux de recherche et l'expertise acquise en gazéification n'auraient pas pu être faits sans l'aide et le support de plusieurs personnes. J'aimerais remercier Guy Drouin, de Biothermica Technologies inc. qui m'a proposé le projet de recherche et qui a mis à ma disposition les ressources nécessaires à la bonne réalisation du projet et qui m'a intégré au comité scientifique de l'entreprise. L'expertise et l'aide de Jamal Chaouki m'ont permis de résoudre plusieurs problématiques du génie chimique. Son expérience, sa dévotion pour la qualité de l'enseignement en génie chimique, son encadrement et ses conseils judicieux m'ont permis de résoudre adroitement les problèmes de recherche. Tout au long du projet, il a veillé à mettre à ma disposition les ressources et l'équipe nécessaire pour m'assister dans mes travaux de recherche. Remerciements sincères à Ramin Radmanesh pour son aide dans l'explication du modèle informatique utilisé dans le cadre de ses travaux de recherche. Les manipulations et les modifications au réacteur n'auraient pas pu être possibles sans les techniciens Daniel Dumars, Robert Delisle et Carole Pinchaud du département de génie chimique. Les difficultés de résolution numérique ont pu être résolues grâce aux conseils de Mourad Heniche et de Marc Laforest qui m'ont renseigné sur les bonnes méthodes de résolutions numériques des problèmes mathématiques rencontrés. Merci à Jean-Philippe Laviolette pour son aide sur les explications de fonctionnement du chromatographe en phase gazeuse et à Mania Abdollahineisiani pour sa collaboration à la mise en place du réacteur et à l'explication de la méthodologie de prises de mesures. Merci à Luc Charbonneau du laboratoire d'analyses environnementales pour son aide dans l'analyse des émissions atmosphériques des produits de combustion et du gaz de synthèse.

Résumé

Dans le but de mieux comprendre les processus régissant les réactions de gazéification de la biomasse dans un lit fluidisé à bulles, un modèle phénoménologique est proposé. Ce document présente les résultats d'expériences de gazéification sur un réacteur pilote (1.65 m de hauteur x 7.8 cm de diamètre) fluidisé à l'air et compare ceux-ci aux données des simulations. Le modèle unidimensionnel à deux phases prend en compte l'hydrodynamique des gaz et des solides dans le lit fluidisé ainsi que les réactions chimiques; il peut prédire le profil de concentration sur l'axe du réacteur. Une approche CCBM (counter-current backmixing) a été utilisée afin de modéliser le mélange des particules dans le lit. Les conditions thermodynamiques sont de 800°C à pression atmosphérique et le débit d'alimentation de la biomasse est de 20 g/min. La vitesse superficielle de l'air est de 2-3 fois plus élevée que la vitesse minimale de fluidisation (0.1 m/s). Les résultats du modèle sont comparés aux résultats expérimentaux et d'autres travaux de recherches sur la gazéification du bois en lits fluidisés à bulles. L'effet du rapport d'équivalence et la température du lit sur le pouvoir calorifique supérieur (PCS), la concentration de goudron, le taux de conversion de la biomasse en gaz et la concentration sont étudiés. Le modèle est en accord avec les résultats reportés dans la littérature et est consistant avec les données expérimentales réalisées en laboratoire. Des écarts entre la composition des gaz prédits par le modèle et les données expérimentales suggèrent que certaines cinétiques de réactions utilisées dans le modèle sont erronées. Des analyses de gaz ont été réalisées afin de déterminer le potentiel de toxicité du gaz de synthèse obtenu par la gazéification des bardeaux d'asphalte. Les résultats montrent la présence de COV, benzène, SO_x, NO_x et des possibles traces de furanes. Des données quantitatives supplémentaires sont fortement suggérées.

Abstract

This document presents the results from biomass gasification experiments in a pilot-scale (1.65 m tall x 7.8 cm diameter) air blown bubbling fluidized bed gasifier (BFBG) and compares them with computer simulations. The two-phase one dimensional model encompasses the hydrodynamics of gas and solids and the reaction kinetics; it can predict the concentration profile along the reactor axis. A CCBM approach was used to model the solid mixing in the bed. The thermodynamics conditions are 800°C at atmospheric pressure and the feeding rate is 20 g/min. The air velocity is 2-3 times higher than minimum velocity (0.1 m/s). Model results are compared with the experimental work of

this study and other published results on wood gasification in BFBG. Effects of equivalence ratio (ER) and bed temperature on the syngas HHV, tar concentration, gas yield and syngas concentration are studied. Proximate and ultimate analyses for wood and asphalt shingles have been determined and are used in the mathematical model. The model shows good agreement with experimental results reported by others and is consistent with experimental trends. Some discrepancies between the model and experimental values suggest that some reaction rates used in the model are not adequate. Gas analyses were carried out in order to determine the toxicity of the gas obtained by asphalt shingles gasification. Results show the presence of VOC, benzene, SO_x, NO_x and possible traces of furanes. Further quantitative analyses are strongly suggested.

Table des matières

REMERCIEMENTS.....	IV
RÉSUMÉ.....	V
ABSTRACT	VI
TABLE DES MATIÈRES	VII
1 INTRODUCTION.....	1
CONTRIBUTIONS DE CE MÉMOIRE	2
PLAN DU MÉMOIRE	2
2 REVUE DE LITTÉRATURE	4
2.1 LA GAZÉIFICATION : MISE EN CONTEXTE	4
2.2 LES RÉACTIONS CHIMIQUES EN JEU	5
2.3 LES SOURCES D'APPROVISIONNEMENT	8
2.4 CARACTÉRISTIQUES DE LA BIOMASSE	9
2.5 LES TECHNOLOGIES DE GAZÉIFICATION.....	15
2.6 AVANTAGES ET INCONVÉNIENTS DES GAZOGÈNES	25
2.7 DÉFIS ET DIFFICULTÉS TECHNIQUES	26
2.8 LES AVANTAGES ET LES INCONVÉNIENTS DE LA GAZÉIFICATION	27
2.9 ASPECTS SOCIO-ÉCONOMIQUES	28
2.10 ASPECTS TECHNIQUES	28
3 MODÉLISATION DE LA GAZÉIFICATION DE LA BIOMASSE EN LIT FLUIDISÉ.....	31
3.1 REVUE DE LITTÉRATURE	31
3.2 PROBLÈMES.....	37
3.3 OBJECTIFS	38

3.4	MÉTHODOLOGIE.....	38
4	DESCRIPTION MATHÉMATIQUE DU MODÈLE.....	40
4.1	HYPOTHÈSES DU MODÈLE.....	40
4.2	VITESSES CRITIQUES DE FLUIDISATION.....	42
4.3	HYDRODYNAMIQUE DE FLUIDISATION.....	44
4.4	EXPANSION DU LIT	48
4.5	BULLES	49
4.6	POROSITÉ	49
4.7	COEFFICIENT D'ÉCHANGE DE MATIÈRE ENTRE LES DEUX PHASES	52
4.8	ZONE D'EMPORTEMENT.....	53
4.9	BILANS MOLAIRES	53
4.10	ZONE D'EMPORTEMENT.....	58
4.11	MODÈLE DU MÉLANGE DES PARTICULES	59
4.12	MODÈLE CINÉTIQUE	63
4.13	POUVOIR CALORIFIQUE DU COMBUSTIBLE.....	67
4.14	POUVOIR CALORIFIQUE DU GAZ DE SYNTHÈSE.....	67
4.15	RAPPORT D'ÉQUIVALENCE	67
5	MÉTHODOLOGIE EXPÉRIMENTALE	69
5.1	RÉACTEUR	71
5.2	BIOMASSE	72
5.3	CARACTÉRISATION DE LA BIOMASSE.....	73
5.4	ANALYSE ÉLÉMENTAIRE	74
5.5	MESURE DE LA VITESSE MINIMALE DE FLUIDISATION	74
5.6	MESURES DE CONCENTRATIONS EN POLLUANTS ATMOSPHÉRIQUES	75
6	PRÉSENTATION ET DISCUSSION DES RÉSULTATS.....	76
6.1	CARACTÉRISATION DE LA BIOMASSE.....	76
6.2	POUVOIR CALORIFIQUE	77

6.3	GRANULOMÉTRIE DU SABLE.....	78
6.4	VITESSE MINIMALE DE FLUIDISATION.....	79
6.5	MODÉLISATION DU MÉLANGE DES PARTICULES.....	79
6.6	HYDRODYNAMIQUE ET PHASES	84
6.7	CONDITIONS OPÉRATOIRES.....	85
6.8	PROFILS DE CONCENTRATION	85
6.9	EFFET DU RAPPORT D'ÉQUIVALENCE.....	88
6.10	EFFET DE LA TEMPÉRATURE	93
6.11	ÉMISSIONS.....	97
7	CONCLUSION.....	99
	BIBLIOGRAPHIE.....	101
	ANNEXES.....	109

Liste des tableaux

Tableau 2.1 : Réactions chimiques et enthalpies de réaction.....	7
Tableau 2.2: Secteurs pouvant utiliser la gazéification de la biomasse.....	8
Tableau 2.3: Caractéristiques importantes de la biomasse ayant un effet sur les propriétés du gaz de synthèse.....	9
Tableau 2.4: Pouvoir calorifique supérieur de certains types de biomasse.....	11
Tableau 2.5: Densité volumique et énergétique de divers combustibles.....	13
Tableau 2.6: Étapes de traitement des déchets.....	14
Tableau 2.7: Coût de divers types de biomasse.....	14
Tableau 2.8: Avantages du lit fluidisé circulant par rapport au lit fluidisé à bulles..	20
Tableau 2.9: Avantages et inconvénients des 5 principaux types de gazogènes.....	25
Tableau 2.10: Difficultés relatives à la pyrolyse et à la gazéification.....	27
Tableau 2.11: Aspects socio-économiques.....	28
Tableau 2.12: Avantages et inconvénients de la gazéification de la biomasse.....	29
Tableau 4.1: Liste des réactions chimiques entre le gaz et les particules de char (réactions g-s).....	65
Tableau 4.2 : Liste des réactions homogènes utilisées dans le modèle.....	66
Tableau 4.3 : Résumé du système d'équation.....	69
Tableau 4.4 : Résumé des équations de propriétés de la biomasse et du gaz de synthèse.....	70
Tableau 6.1: Caractéristiques des combustibles étudiés.....	76
Tableau 6.2: Propriétés de la biomasse et analyse élémentaire.....	77
Tableau 6.3: Pouvoir calorifique inférieur et supérieur du bois et du bardeau d'asphalte.....	78
Tableau 6.4 : Pas de temps et temps de calcul.....	80
Tableau 6.5: Conditions opératoires et composition du gaz de synthèse (base sèche).....	85

Liste des figures

Figure 2.1: Réactions chimiques dans un gazogène.....	6
Figure 2.2: PCI en fonction du taux d'humidité dans le bois.....	9
Figure 2.3: Types de biomasse d'origine ligneuse.....	12
Figure 2.4: Proportion des types de gazogènes sur le marché.....	15
Figure 2.5: Schéma du gazogène à lit mouvant à contre-courant (updraft).....	17
Figure 2.6: Schéma du gazogène à lit mouvant à co-courant (downdraft).....	18
Figure 2.7: Schéma du gazogène à lit entraîné.....	19
Figure 2.8: Schéma du gazogène à lit fluidisé a) circulant b) à bulles.....	20
Figure 2.9: Chute par gravité.....	21
Figure 2.10: Différentes configuration de convoyeur à vis.....	22
Figure 2.11: Système d'alimentation par pulvérisation.....	23
Figure 2.12: Système d'injection pneumatique.....	24
Figure 2.13: Fente amovible.....	24
Figure 3.1: Organigramme de réalisation du modèle informatique.....	39
Figure 4.1 : Schéma de résolution du modèle mathématique.....	40
Figure 4.2 a) Phénomène des bulles dans un lit fluidisé. b) Distribution axiale du volume des deux phases.....	44
Figure 4.3: Schéma conceptuel du modèle à deux phases présentant le volume occupé par les deux phases à une hauteur donnée.....	45
Figure 4.4: Élément infinitésimal dz et surfaces occupées par les deux phases.....	54
Figure 4.5: Modèle CCBM. Élément infinitésimal dz	60
Figure 5.1 : Schéma du montage du gazogène expérimental.....	71
Figure 5.2 : Schéma du montage du gazogène expérimental.....	72
Figure 6.1: Granulométrie du sable.....	78
Figure 6.2: Perte de charge en fonction de la vitesse superficielle à 298 K et 1073 K.....	79
Figure 6.3: Profil axial de concentration en fonction du temps.....	81

Figure 6.4: Profil axial de concentration en fonction du temps.....	82
Figure 6.5: Méthode de tir. Conversion carbone en fonction de la hauteur du lit (m) dans les phases ascendantes et descendantes.....	83
Figure 6.6: Débit molaires des deux phases au travers du lit. (air seulement).....	84
Figure 6.7: Profil de concentration pour une alimentation par le bas.....	86
Figure 6.8: Profil agrandi de la concentration pour une alimentation par le bas.....	87
Figure 6.9: Profil de concentration pour une alimentation par le dessus.....	88
Figure 6.10: Pouvoir calorifique supérieur en fonction du rapport d'équivalence...	89
Figure 6.11: Concentration de H_2 , CH_4 , CO et CO_2 en fonction du rapport d'équivalence.....	90
Figure 6.12: Taux de conversion gaz/biomasse en fonction du rapport d'équivalence.....	92
Figure 6.13: Concentration de goudron en fonction du rapport d'équivalence.....	93
Figure 6.14: Pouvoir calorifique supérieur du gaz de synthèse en fonction de la température du lit.....	94
Figure 6.15: Concentration des gaz en sortie du réacteur en fonction de la température du lit.....	95
Figure 6.16: Taux de conversion gaz/biomasse en fonction de la température du lit.....	96
Figure 6.17: Concentration de goudron dans le gaz de synthèse en fonction de la température du lit.....	97

Liste des annexes

Annexe 1 : Calcul de la vitesse terminale d'une particule.....	109
Annexe 2 : Exemples de calcul.....	113
Annexe 3 : Mélange de la phase solide : résolution du système d'équation pour le modèle CCBM.....	114
Annexe 4 : Composition élémentaire de la biomasse.....	117
Annexe 5 : Caractéristiques des différents types de gazogènes.....	121
Annexe 6 : Préfacteurs en fonction de la température.....	122

Listes des sigles et abréviations

A	Aire du réacteur [m^2]
C	concentration molaire [mol/m^3]
d	diamètre [m]
dV	élément infinitésimal de volume [m^3]
dz	élément infinitésimal de longueur [m]
dt	élément infinitésimal de temps [s]
D	coefficient de diffusion [$1/\text{s}$]
K_w	coefficient d'échange de matière entre les phases ascendante et descendante
f	fraction volumique
F	débit molaire [mol/s]
g	accélération gravitationnelle [m/s^2]
H	hauteur du réacteur (lit+zone d'emportement+hauteur de désengagement) [m]
J	flux de matière [$\text{mol}/\text{m}^2/\text{s}$]
m	masse
M	masse molaire [g/mol]
P	pression [Pa]
PCI	Pouvoir calorifique inférieur [MJ/kg si solide, MJ/Nm^3 si gaz]
PFR	Plug Flow Reactor
Q	Chaleur [kJ]
R	taux de réaction global ou numéro de réaction
r	taux de réaction [$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$] ou rayon
S	Surface du lit [m^2]
T	température [K]
w	fraction massique [kg/kg]
U	vitesse superficielle [m/s]
u	vitesse du gaz à une hauteur z
V	volume [m^3]

X terme de conversion

Indices

0 initial (à $t = 0$)

1 phase ascendante

2 phase descendante

as ascendant

ash cendres

b phase bulle

bm biomasse

BE bulle-émulsion

c carbone

ds descendant

D lit

e phase émulsion

ext externe (pour le rayon externe d'une paroi)

E phase émulsion

g gaz

gb gaz dans la phase bulles

ge gaz dans la phase émulsion

h enthalpie

hom homogène

het hétérogène

i numéro d'élément

j numéro de réaction

k coefficient de transfert par conduction [kW/m]

mf fluidisation minimale

mb	(vitesse) minimales des bulles
p	particule
r	réacteur
ref	référence (conditions ambiantes)
T	total
w	paroi (wall)
y	fraction molaire (ou fraction volumique)
z_0	variable considérée à $z=0$.

Symboles grecs

δ	épaisseur de la paroi
∇	gradient
ε	porosité
ρ	masse volumique [kg/m^3]
μ	viscosité [kg/m/s]
ϕ	sphéricité
Φ	champ vectoriel du flux de matière [$\text{kg/m}^2/\text{s}$]
ν	coefficient stœchiométrique

1 Introduction

Depuis le début des années 90, les organismes de surveillance du climat ont attiré notre attention sur l'évolution des gaz dans l'atmosphère, notamment la concentration en dioxyde de carbone (CO_2) corrélée avec la température. Le constat est frappant et suggère que l'activité humaine est la cause de la fulgurante croissance de la concentration en gaz à effet de serre (GES). Bien que le rôle du CO_2 ait fait l'objet de débats dans la communauté scientifique, il est aujourd'hui généralement accepté que les émissions de CO_2 sont une cause majeure du dérèglement climatique [1]. La prise de conscience globale a conduit les gouvernements à fixer des cibles de réduction des GES. La Convention cadre des Nations unies sur les changements climatiques (1992) suivi du protocole de Kyoto (1997) ont été un premier pas dans l'instauration d'une plateforme juridique et d'un calendrier permettant aux pays signataires de réduire leurs émissions de gaz à effets de serre. Depuis lors, force est de constater que les objectifs sont encore loin d'être atteints; la série de conférences qui ont suivi ont fait apparaître des divergences entre des pays. De plus, le rapport [2] de l'ONU (GEO-4) a critiqué sévèrement les pays n'ayant pas réussi à réduire leur cibles d'émissions, dont le Canada et les États-Unis, qui sont désormais au banc des accusés. Bien que certains gouvernements tardent à légiférer et prendre des mesures concrètes, la place de plus en plus importante qu'occupe l'environnement dans les processus de décision aura comme effet de faciliter l'apparition de technologies innovatrices de production d'énergie, moins polluantes et permettant de s'affranchir peu à peu des énergies fossiles. En effet, certains pays par l'entremise d'un partenariat [3], préconisent le développement de nouvelles technologies pour réduire leurs émissions. Des technologies prometteuses telles que la gazéification de la biomasse vont, dans ce sens, contribuer à réduire les émissions de gaz à effet de serre, valoriser les déchets organiques et la biomasse ainsi que produire une variété de produits dérivés. De plus, la biomasse est considérée comme étant la troisième source en importance après le charbon et le pétrole. Un approvisionnement énergétique basé sur la biomasse plutôt que le pétrole permettrait de

fermer le cycle du carbone, induisant ainsi une réduction des émissions de CO_2 . Ces nombreux avantages et la nécessité de se tourner vers des énergies alternatives explique l'intérêt marqué depuis quelques années sur la gazéification de la biomasse.

Contributions de ce mémoire

Les recherches effectuées dans le cadre du présent projet de recherche ont été réalisées au cours d'un partenariat industriel avec l'entreprise *Biothermica Technologies*. Dans le cadre du projet de développement de *Biothermica Technologies Inc.*, le projet de gazéification permettra, au terme de sa réalisation, de convertir la biomasse en gaz synthétique, fournissant ainsi 10 MWe supplémentaire à la centrale Gazmont, laquelle est déjà alimentée en biogaz provenant de la carrière Miron. Les recherches effectuées au cours du projet de maîtrise visent à développer un modèle phénoménologique qui sera éventuellement extrapolé au réacteur industriel afin de prévoir la composition du gaz de synthèse en fonction des paramètres internes. Le modèle permet, pour une biomasse donnée, de connaître les propriétés du gaz de synthèse en fonction des paramètres d'opération du réacteur. Ce travail établit les bases d'une compréhension en profondeur des phénomènes impliqués dans la gazéification de la biomasse en lit fluidisé et constitue un avancement important dans la compréhension des procédés ayant lieu à l'échelle microscopique.

Plan du mémoire

Une revue de littérature aborde le sujet de la gazéification de la biomasse, ses implications techniques, économiques et les défis de la recherche. Le chapitre 2 est une revue de littérature sur la modélisation de la gazéification de la biomasse en lit fluidisé. Diverses approches sont étudiées afin d'en faire ressortir les forces et faiblesses et d'avoir une vue d'ensemble sur les techniques de modélisation. Le chapitre 3 présente le développement théorique du modèle mathématique utilisé. Les équations sont décrites en détail et des schémas explicatifs permettent au lecteur de comprendre les modèles. Le chapitre 4 présente les équipements de laboratoire sur lesquels ont eu lieu

les expériences et la méthodologie employée pour réaliser la prise de mesures. Le chapitre 5 présente les résultats de simulations obtenus ainsi que la corrélation avec les résultats expérimentaux. Une discussion des résultats permet d'expliquer les implications, les limites et lacunes du modèle et les phénomènes observés.

2 Revue de littérature

2.1 La gazéification : mise en contexte

La gazéification est un phénomène connu depuis le 18^e siècle et était utilisée en Europe pour produire un gaz synthétique servant à éclairer et chauffer les habitations. Jusqu'à l'arrivée des combustibles fossiles, les gaz produits par gazéification étaient même utilisés pour alimenter des moteurs à combustion. Le déclin de cette technologie fut accéléré par la facilité d'accès au pétrole et ses dérivés, lesquels nécessitent une transformation moins complexe. Il y eut un regain d'intérêt lors de la deuxième guerre mondiale pendant laquelle l'approvisionnement en pétrole fut limité; ceci favorisa la recherche dans le domaine de la gazéification. Dans les années 40, plusieurs technologies étaient disponibles et produites en Angleterre [4]. Le déclin de cette technologie fut observé à nouveau après la fin de la guerre, période pendant laquelle les prix du pétrole furent très abordables. Suite au choc pétrolier des années 70, la technologie fut à nouveau l'objet d'une attention particulière. Ces dernières années, avec l'importance accordée à la protection de l'environnement et à l'augmentation des cours du pétrole à des niveaux records [5], la gazéification fait l'objet d'un nouvel engouement, avec de nombreux projets pilotes dans plusieurs pays. De surcroît, ce procédé est maintenant promu au rang des technologies clés menant à la sécurité énergétique. Bien que la technologie soit ancienne, une comparaison entre les procédés modernes et ceux datant des années 40 révèle que la technologie est restée sensiblement la même. Il y a donc encore place à la recherche et à l'innovation. En effet, la technologie peine à s'implanter et les puissances installées varient généralement entre 1 et 100 MWth.

La gazéification est un processus thermique qui convertit un combustible solide, soit de la matière organique telle que le charbon, les boues d'épuration, les déchets et la biomasse en un gaz par oxydation partielle en présence d'oxygène (agent gazéifiant ou

agent oxydant). Ce processus a lieu à des températures élevées ($T > 800\text{ }^{\circ}\text{C}$) et en présence d'un agent gazéifiant qui peut être de l'oxygène, de l'air, un mélange air/vapeur ou CO_2 /air. Contrairement à la combustion, le phénomène a lieu dans une atmosphère pauvre en oxygène mais suffisamment riche pour ne pas être dans le régime de pyrolyse (procédé anaérobique). Les produits de réaction principaux sont l'hydrogène (H_2), le méthane (CH_4), le monoxyde de carbone (CO), le dioxyde de carbone (CO_2), la vapeur d'eau (H_2O), des cendres (ash), du charbon (char) et du goudron (tar).

2.2 Les réactions chimiques en jeu

De nombreuses réactions chimiques ont lieu dans un gazogène, celles-ci peuvent être classées en trois classes : pyrolyse, combustion et gazéification. Les premières réactions sont dues au séchage de la biomasse ($100\text{-}200^{\circ}\text{C}$) et à la pyrolyse ($230\text{-}700^{\circ}\text{C}$); celles-ci sont endothermiques. Les produits de réaction (gaz stables, goudron, charbon et cendres) participent à leur tour à de nouvelles réactions. Dans un environnement contenant une quantité suffisante d'agent oxydant (air, H_2O , O_2 , CO_2), la combustion ($700\text{-}1500^{\circ}\text{C}$) des gaz serait complète. Par contre, dans un environnement pauvre en agent oxydant, la combustion complète ne peut avoir lieu, favorisant ainsi des réactions de réduction, c'est-à-dire les réactions de gazéification. Cette dernière est, quant à elle, un processus dit auto-thermique, c'est-à-dire que la chaleur nécessaire pour que les réactions de gazéification et de craquage du goudron aient lieu provient de la combustion (exothermique) des gaz volatiles et des résidus carbonés (charbon, goudron). Le schéma suivant illustre le phénomène.

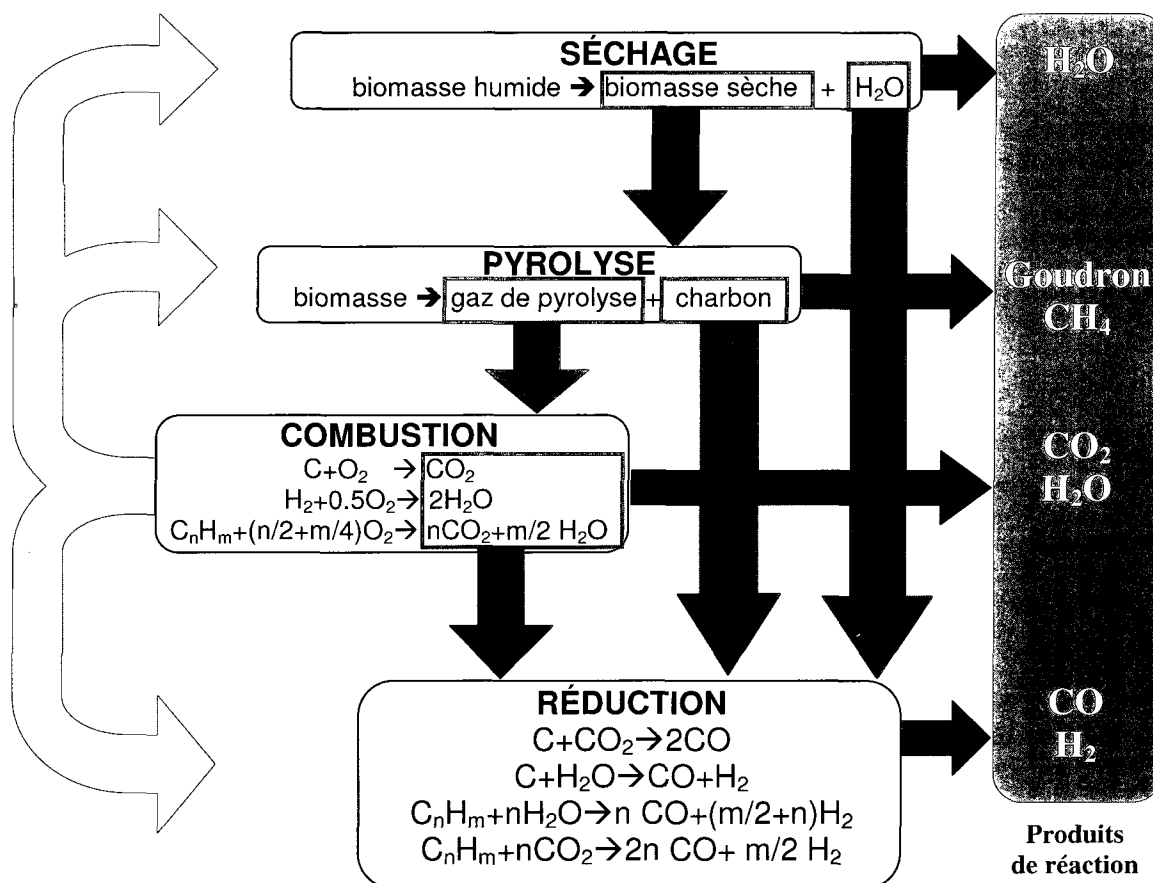


Figure 2.1: Réactions chimiques dans un gazogène

Un contrôle précis du ratio biomasse / agent oxydant permet ainsi d'entretenir la réaction et de maximiser le pouvoir calorifique du gaz synthétique [6]. Cependant, la circulation d'air permettant la combustion partielle a pour effet de diminuer le pouvoir calorifique du gaz produit étant donné la dilution de celui-ci avec l'azote. Le rapport d'équivalence, défini comme le rapport air/biomasse actuel par rapport au rapport air/biomasse requis pour la combustion est donc un paramètre important dans le procédé de gazéification. L'ajout de vapeur d'eau et / ou d'oxygène permet de reformer le méthane et d'augmenter la quantité d'hydrogène produit. Le tableau 2.1 résume les caractéristiques des réactions chimiques dans le gazogène.

Tableau 2.1 : Réactions chimiques et enthalpies de réaction [7]

Processus	Réaction chimique	ΔH [kJ/mol]
Pyrolyse	$Biomasse \Rightarrow H_2 + CO + CO_2 + CH_4 + H_2 + \text{goudron} + \text{cendres} + \text{charbon}$	Endothermique
Gazéification	$\lambda C + O_2 \Rightarrow 2(\lambda - 1)CO + (2 - \lambda)CO_2$	-111 (exo)
	Réaction Boudouard $C + CO_2 \Leftrightarrow 2CO$	+172 (endo)
	Réaction Eau-gaz $C + H_2O \Rightarrow CO + H_2$	+131 (endo)
	Méthanisation $C + 2H_2 \Rightarrow CH_4$	-75 (exo)
	« Shift conversion » $CO + H_2O \Leftrightarrow H_2 + CO_2$	+42 (endo)
Craquage du goudron	$Goudron \Rightarrow v_{H_2} H_2 + v_{CH_4} CH_4 + v_{CO} CO + v_{CO_2} CO_2$	Endothermique
Réactions homogènes	$H_2 + 1/2 O_2 \Leftrightarrow H_2O$	-242 (exo)
	$CH_4 + 2O_2 \Leftrightarrow CO_2 + 2H_2O$	
	$CO + 1/2 O_2 \Leftrightarrow CO_2$	-283 (exo)
Reformage du méthane	$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + 2H_2$	+206 (endo)

À l'issue de ces réactions, sort du gazogène un gaz synthétique appelé *gaz de synthèse* dont la composition varie selon le combustible utilisé, l'agent gazéifiant, la température, la pression d'opération, l'humidité du combustible et le type de gazogène. Typiquement, le pouvoir calorifique inférieur (PCI) est de 5 à 6 MJ/kg (3-6 MJ/Nm³). Lorsque l'agent oxydant est de l'oxygène, le pouvoir calorifique du syngaz peut atteindre 15 MJ/kg (10-12 MJ/Nm³). Le pouvoir calorifique maximal est obtenu en utilisant la vapeur d'eau, ce qui permet d'atteindre un PCI de 15-20 MJ/Nm³. À titre de comparaison, le propane commercial atteint 50 MJ/kg [8] (40 MJ/m³). La prédiction de la composition du gaz de sortie est un phénomène complexe qu'il convient de modéliser par un modèle approprié. À cet effet, il est nécessaire de comprendre les phénomènes impliqués tels que les cinétiques des réactions et l'hydrodynamique du lit fluidisé. De nombreux modèles ont été développés et certains d'entre eux permettent d'approcher assez fidèlement les compositions réelles [9].

2.2.1 Pyrolyse de la biomasse

La pyrolyse, contrairement à la gazéification, est un processus qui permet de transformer de façon anaérobie la matière organique en composés solides, liquides et gazeux. Les résidus solides sont composés de minéraux, de charbon de bois et de goudron. Lorsque condensées à température ambiante, les vapeurs produites par la destruction du combustible donnent une huile pyrolytique. Cette huile peut servir de combustible et peut entrer dans la fabrication du phénol dans l'industrie chimique.

La pyrolyse est le processus initiateur des réactions de gazéification et a lieu en l'absence d'oxygène pour des températures entre 200 et 700°C. Ces températures ont lieu en périphérie de la zone de gazéification. À cette gamme de température, du goudron est produit dans le réacteur.

2.3 Les sources d'approvisionnement

La gazéification de la biomasse représente un marché important et encore peu développé. Le tableau 1.2 représente quelques secteurs majeurs générant de la biomasse et qui pourraient accroître leur productivité ou valoriser leurs résidus par l'utilisation d'une technologie de gazéification de la biomasse. Ces secteurs constituent également des sources d'approvisionnement en combustible.

Tableau 2.2: Secteurs pouvant utiliser la gazéification de la biomasse.

Secteurs	Type de combustible
Pâtes et papier	Détritus organiques
Industrie forestière	Résidus de coupe de bois des forêts et des terres non cultivées
Industrie de transformation du bois	Copeaux de bois, résidus des scieries
Secteur de la construction/rénovation	Bardeaux d'asphalte, bois de construction
Municipalités	Matières résiduelles compostables, boues d'épuration, déchets solides
Secteur de l'agriculture	Résidus de défrichage et de la transformation des cultures
Secteur de l'élevage	Purin, charogne

2.4 Caractéristiques de la biomasse

2.4.1 Propriétés physiques de la biomasse

Les propriétés du syngaz (composition, pouvoir calorifique) dépendent des caractéristiques de la biomasse alimentant le gazogène. Les caractéristiques physiques les plus importantes à prendre en compte dans le choix de la biomasse sont relatées dans le tableau 2.2.

Tableau 2.3: Caractéristiques importantes de la biomasse ayant un effet sur les propriétés du gaz de synthèse [6]

Taux d'humidité
Teneur en cendres
Composition élémentaire
Densité volumique et morphologie
Teneur en matière volatiles
Hétérogénéité

Le taux d'humidité de la biomasse est défini comme étant le rapport entre le poids de l'eau et le poids de la biomasse. L'efficacité de conversion est plus grande lorsque la teneur en humidité est faible puisque cela évite de devoir faire passer la biomasse dans un séchoir. La figure ci-dessous illustre la variation du pouvoir calorifique inférieur du bois en fonction du taux d'humidité.

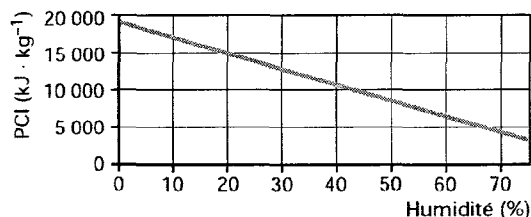


Figure 2.2: PCI en fonction du taux d'humidité dans le bois [10].

De plus, une biomasse relativement sèche donne un syngaz ayant un pouvoir calorifique plus grand, une meilleure efficacité de conversion et moins de goudron.

Les cendres sont les composés solides inorganiques ou minéraux qui restent après les réactions de combustion de la biomasse. Certains types de biomasse peuvent contenir davantage de ces composés (0.1% pour le bois jusqu'à 15% pour les produits agricoles), ce qui implique alors une plus grande quantité de cendres produites. Ces cendres peuvent former des agglomérations, encrasser le réacteur et le boucher progressivement. De plus, elles peuvent engendrer l'apparition de « canaux » dans le réacteur, ce qui entrave le bon fonctionnement du réacteur par une mauvaise oxydation de la biomasse et l'apparition de zone froides et chaudes. Le design du réacteur, notamment le système de collecte des cendres, doit donc prendre en compte ce phénomène en fonction du type de biomasse qui y est introduit.

La composition élémentaire de la biomasse, c'est-à-dire les éléments atomiques et moléculaires en présence, est directement liée à la composition du syngaz et des émissions produites. En effet, plus la concentration en carbone augmente, plus le pouvoir calorifique du syngaz augmente. De plus, la faible présence d'azote et de soufre dans la biomasse implique de faibles concentrations en oxydes d'azote (NO_x) et d'oxydes sulfuriques (SO_x). Même le bois de construction contenant de la peinture et du vernis s'est révélé faible en concentration de ces contaminants.

Le tableau 2.4 contient les valeurs calorifiques associées à divers types de biomasse séchés. À titre de comparaison, le pouvoir calorifique du propane commercial y est inclus.

Tableau 2.4: Pouvoir calorifique supérieur de certains types de biomasse [11, 12]

Biomasse	Pouvoir calorifique supérieur (MJ/kg)
Charogne de volaille	8.8
Boues municipales (solides)	9.5
Résidus de bois (hum. 50%)	10
Papier glacé	10.4
Papier recyclé	13.6
Déchets hospitaliers	14
Paille	15
Déchets industriels typiques	16
Carton	16.9
Déchets municipaux	18.5
Chêne (duramen)	18.5
Charogne (viande et os)	18.6
Papiers journaux	19.3
Épinette (hum 0%)	19.3
PVC	22.8
Carton de jus (multi-matériaux)	24.4
Pneus	32
PS	42.1
HDPE (plastique)	46.4
PP	46.4
LDPE	46.6
Propane commercial	50

Le pouvoir calorifique supérieur varie peu selon le type d'essence de bois [10, 11]. En effet, celui-ci varie de 17.7 MJ/kg (*Eucalyptus*) à 20.9 MJ/kg (cèdre *duramen*). Par contre, un bois fraîchement coupé, voit sa valeur calorifique diminuer de plus de moitié, à près de 8 MJ/kg en raison de son contenu en eau.

La masse volumique apparente et la morphologie diffère grandement selon le type de biomasse et le type d'essence. Combiné avec le pouvoir calorifique, cette caractéristique détermine la densité énergétique (MJ/m^3) du combustible et a un impact direct sur les performances du réacteur ; on utilise ce paramètre pour caractériser le combustible au lieu du pouvoir calorifique donné en kJ/kg . La forme selon laquelle se présente la biomasse détermine sa densité ; elle oscille ainsi de 100 à 1000 kg/m^3 . Les combustibles ayant une densité élevée seront favorisés étant donné leur facilité d'entreposage et de transport.

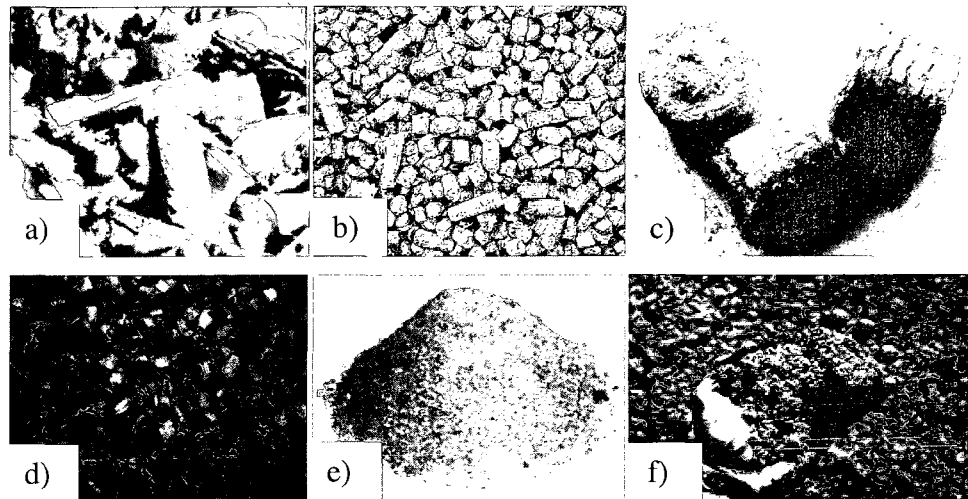


Figure 2.3: Types de biomasse d'origine ligneuse. a) bûches b) granules de bois c) balles de sciures d) copeaux de bois e) sciures f) boues d'épuration solides

Le tableau 2.5 relate la densité, le taux d'humidité moyen et la densité énergétique de certains types de biomasse.

Tableau 2.5: Densité volumique et énergétique de divers combustibles [10, 11]

Biomasse	Taux d'humidité moyen [%]	Masse volumique apparente [kg/m ³]	Densité énergétique [MJ/m ³]
Granules de bois (wood pellets)	10	600	9921.6
Copaux de bois pré-séché (feuillus)	30	320	3938.4
Copaux de bois (feuillus)	50	450	3632.4
Copaux de bois pré-séché (conifères)	30	250	3078.0
Copaux de bois (conifères)	50	350	2826.0
Balles d'herbe	18	200	2700.0
Écorces	50	320	2617.2
Triticale	15	175	2530.8
Sciures	50	240	1936.8
Paille (blé)	15	120	1735.2

La teneur en matières volatiles (composés aromatiques et sulfureux, chaînes longues hydrocarbonées) que contient le combustible a une incidence sur le goudron produit dans le gazogène. La composition en matière volatiles est généralement entre 50 et 80%. Il est donc possible de diminuer le goudron produit par le choix d'un type d'essence présentant une proportion moins élevée en composés volatiles.

Lorsque la matière première est homogène, celle-ci peut être introduite presque automatiquement dans le gazogène, à condition que celle-ci ait un taux d'humidité en dessous d'une valeur critique maximisant l'efficacité énergétique du procédé (énergie nécessaire pour sécher vs. énergie produite).

Les déchets municipaux et industriels sont des exemples de biomasse fortement hétérogène et comportent des éléments qui ne sont pas gazéifiables. Un traitement de la

matière première s'avère donc essentiel et implique alors des coûts associés à l'infrastructure de conditionnement des déchets. Le traitement d'un tel type de biomasse nécessite donc une logistique quant à la gestion des déchets (tableau 2.6).

Tableau 2.6: Étapes de traitement des déchets

Transport jusqu'au site de traitement existant
Tri selon la nature : plastique, métal, verre, organique
Déchiquetage jusqu'à l'atteinte d'une certaine granulométrie
Séchage des déchets
Mélange afin d'obtenir une composition constante de combustible
Transport jusqu'à la centrale de gazéification.

2.4.2 Coût de la biomasse

Le choix d'un type de biomasse est fortement dicté par son coût. La variation du prix dans le temps est un facteur qui peut avoir des conséquences importantes sur la rentabilité du procédé de gazéification. Il est donc important de prévoir des contrats d'approvisionnement à long terme. Le tableau 2.7 donne un aperçu des prix du marché de la biomasse.

Tableau 2.7: Coût de divers types de biomasse [13].

Type de combustible	Prix [US\$/tonne]
Biomasse de qualité moyenne / supérieure : forêts, plantations, récoltes	> 60
Biomasse résiduelle (Résidus forestiers et agricoles)	30 à 60
Résidus de l'industrie de transformation du bois. (De tels résidus peuvent être mélangés ou non)	0 à 30
Biomasse d'origine urbaine : déchets solides municipaux, bois de construction/démolition. Composition hétérogène (biomasse, plastique, inorganique).	-30 à 0
Boues d'épuration : déchets humides	-30 à 0

Les économies réalisées par les municipalités qui n'ont plus à traiter les boues d'épuration et à remplir les sites d'enfouissement permettent de donner gratuitement la biomasse et même de payer des compagnies qui l'utilisent comme matière première.

2.5 Les technologies de gazéification

Le procédé de gazéification semble simple en principe; plusieurs types de gazogènes ont été développés. Afin de bien comprendre ces technologies, il importe d'étudier les principaux concepts, ce qui permettra d'en ressortir les forces et faiblesses en vue de proposer des solutions pour fins d'amélioration du procédé. Il existe plusieurs concepts de gazogènes et ceux-ci peuvent être subdivisés en quatre catégories : *lit entraîné*, *lit fixe/mouvant*, *lit fluidisé à bulle* et *lit fluidisé circulant*. Le lit mouvant peut être subdivisé en lit mouvant à contre-courant et lit mouvant à co-courant. Les principales différences résident dans la manière selon laquelle la matière circule à l'intérieur et les conditions de réaction qui en résultent. Les pressions internes sont généralement à pression atmosphérique (1 atm.) mais certains gazogènes, à des coûts considérablement plus élevés, peuvent opérer à haute pression, soit les gazogènes de type lit fluidisé à bulles ou lit fluidisé circulant. Le type de gazogène utilisé dépend de l'application et de la composition désirée du gaz produit. La figure 2.4 résume la proportion des types de réacteurs sur le marché de la gazéification de la biomasse.

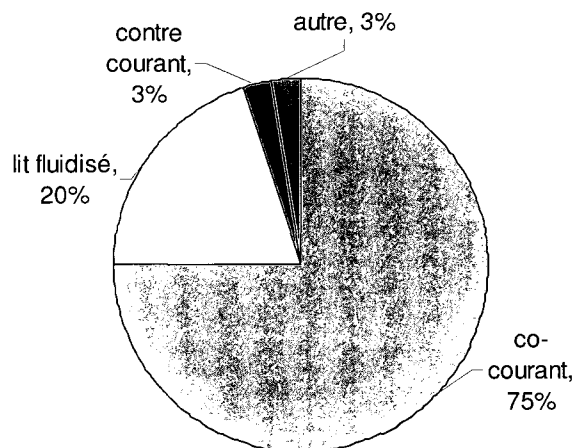


Figure 2.4: Proportion des types de gazogènes sur le marché[14]

2.5.1 Le gazogène

Le gazogène est un réacteur dans lequel surviennent les réactions chimiques de gazéification. Trois composantes principales s'y retrouvent : un conduit d'entrée de la biomasse, une sortie pour les produits de réaction et une entrée pour les produits oxydants. Le tableau de l'annexe 5 présente les avantages et inconvénients de chacun des types de gazogènes.

2.5.1.1 Lit mouvant à contre-courant

Le gazogène à lit mouvant peut être subdivisé en deux sous catégories : le lit mouvant à contre-courant et le lit mouvant à co-courant. Dans la configuration à contre-courant (figure 2.4), le combustible est introduit par la partie supérieure (updraft) et descend progressivement par gravité. Au contact de l'agent oxydant (vapeur d'eau, air ou plus rarement oxygène) introduit par le bas et traversant le réacteur, les réactions de pyrolyse, combustion et gazéification ont lieu. Les produits de réaction sous forme gazeuse sont évacués par le dessus, entraînant avec eux une partie non négligeable de produits de pyrolyse et de particules. La zone de séchage permet de réduire le taux d'humidité dans la biomasse. Dans la zone de pyrolyse, la biomasse est convertie en composés volatiles et en goudron. Dans la zone de réduction, plusieurs réactions au niveau du goudron, dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau permettent d'obtenir du monoxyde de carbone et de l'hydrogène.

Ce type de configuration est caractérisé par une basse température des gaz de sortie, donnant ainsi un rendement thermique élevé. Cependant, le gaz de sortie est très chargé en goudron. Le principal avantage de ce type de réacteur est sa simplicité de construction. Son usage est réservé exclusivement à des fins de combustion directe du syngaz, étant donné le gaz très chargé en particules. L'utilisation du syngaz dans un moteur à combustion nécessite cependant un nettoyage important du gaz. La capacité de ce type d'installation est généralement inférieure à 10 MWth[15].

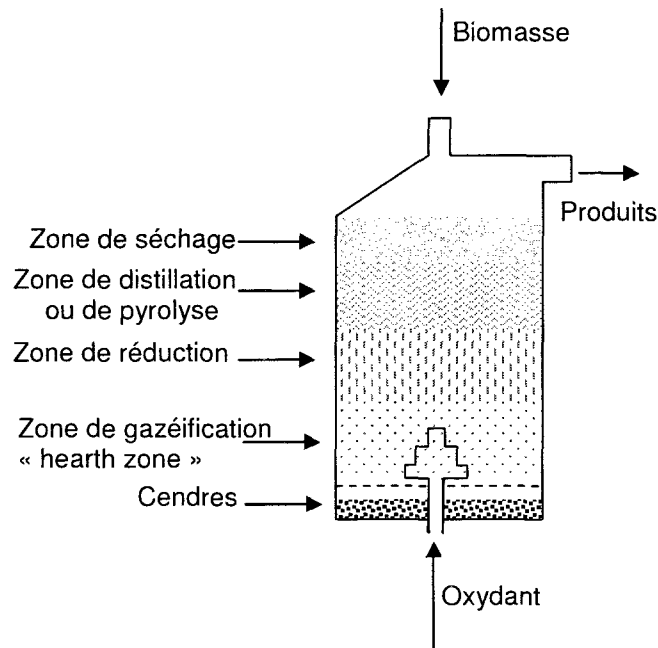


Figure 2.5: Schéma du gazogène à lit mouvant à contre-courant (updraft)

2.5.1.2 Lit fixe co-courant

Dans la configuration co-courant (figure 2.6), l'agent oxydant circule dans la même direction que le combustible, vers le bas (downdraft). Le combustible doit être chauffé par la partie supérieure du gazogène, soit par la combustion d'une partie du combustible ou par des sources externes. Les produits de réaction sortent par le bas à haute température et une partie de la chaleur peut être récupérée pour réchauffer l'agent oxydant, résultant ainsi en une efficacité énergétique accrue par rapport à la configuration contre-courant. Puisque le goudron doit traverser les cendres chaudes formées à la base du réacteur, le gaz de sortie est plus propre que dans la configuration précédente. Cette configuration présente l'avantage d'une simplicité de construction et des taux de conversion élevés. Cependant le mélange entre l'agent oxydant et le combustible n'est pas optimal, résultant ainsi en un transfert de chaleur et de masse faible. Conséquemment, la taille des installations est réduite (< 1 MWth). Ce type de technologie occupe tout de même 75% du marché de la gazéification de la biomasse. La

forme en V permet d'obtenir une zone à haute température permettant le craquage du goudron. Cependant, des blocages peuvent y survenir et la très haute température qui y règne peut accélérer le phénomène de corrosion.

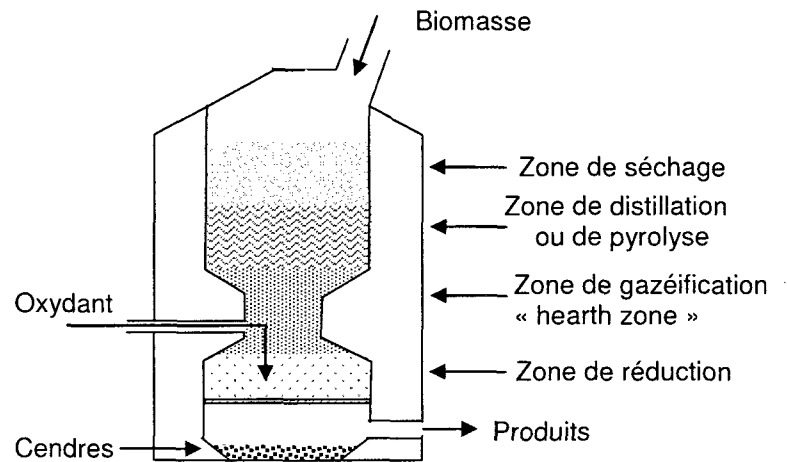


Figure 2.6: Schéma du gazogène à lit mouvant à co-courant (downdraft)

2.5.1.3 Lit entraîné (entrained flow)

Le gazogène à lit entraîné a été utilisé à l'origine pour la gazéification du charbon. Dans ce type de configuration, le combustible pulvérisé ou atomisé est mélangé à de la vapeur d'eau et de l'oxygène ou de l'air. Les réactions de gazéification ont donc lieu dans un nuage dense de particules à très hautes températures. La température et la pression élevées qui règnent dans le réacteur permettent d'obtenir une conversion du carbone élevée. La grande vitesse du gaz qui en résulte implique alors un temps de résidence faible, d'où l'importance des températures élevées permettant d'atteindre une conversion raisonnable du carbone. Le gaz de sortie nécessite cependant d'être refroidi avant d'être nettoyé. La température (1500K) élevée et le faible temps de résidence du gaz impliquent que le goudron et le méthane sont quasi-absents en sortie. La figure 2.6 illustre le schéma du lit entraîné.

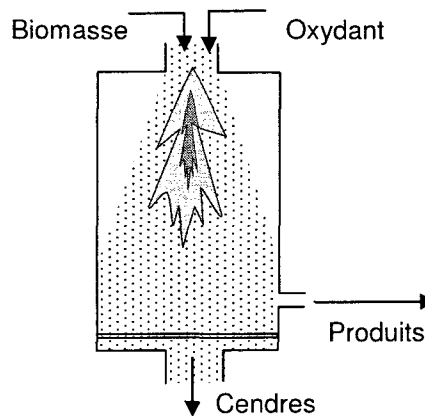


Figure 2.7: Schéma du gazogène à lit entraîné

La haute température a comme effet de vitrifier les cendres et implique une protection en céramique, ce qui cause des problèmes dans le bon fonctionnement du procédé. De plus, la nécessité d'avoir des particules de biomasse de petite taille implique de moudre celles-ci, ce qui nécessite alors un investissement important d'énergie. L'utilisation de cette technologie pour la gazéification de la biomasse est donc limitée.

2.5.1.4 Lit fluidisé

Les réacteurs à lit fluidisé sont sans aucun doute les concepts les plus intéressants pour la gazéification de la biomasse puisque ceux-ci ont été développés pour résoudre les problèmes inhérents aux gazogènes à lit fixe. Le combustible est introduit dans un lit de sable en suspension (lit fluidisé à bulles) ou en circulation (lit fluidisé circulant). Le lit se comporte plus ou moins comme un fluide et est caractérisé par de fortes turbulences. Le lit fluidisé circulant comporte un système permettant de faire circuler la biomasse alors que dans le lit fluidisé, la matière retombe par gravité après être passée dans un cyclone.

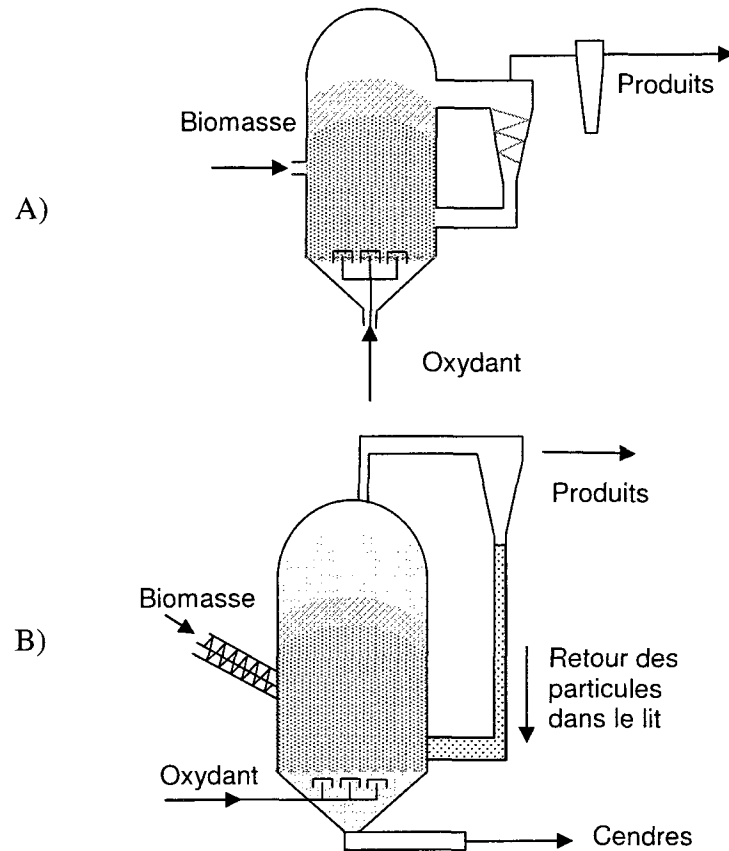


Figure 2.8: Schéma du gazogène à lit fluidisé a) circulant b) à bulles

Le tableau 2.8 résume les avantages du lit fluidisé circulant sur celui à bulles.

Tableau 2.8: Avantages du lit fluidisé circulant par rapport au lit fluidisé à bulles

Meilleur taux de transfert de chaleur et de masse
Moins de restrictions au niveau de la taille et de la géométrie des particules de biomasse
Moins de goudron produit pendant le réchauffement du combustible
Le temps de résidence élevé et la taille très petite des particules donnent des conditions favorables pour une gazéification efficace.
Le débit plus élevé permet d'obtenir de meilleurs taux de conversion
Facilité de « scale up »

2.5.2 Système d'alimentation du gazogène

Le système d'alimentation en biomasse est une partie qui demande une attention particulière dans la conception du gazogène car il a une incidence sur le bon fonctionnement global de la centrale. En effet, des coûts importants sont impliqués les premières années d'opération de la centrale pour résoudre des problèmes de fatigue de l'équipement, présence d'odeurs dans les stocks de combustible, étranglements et de blocages du combustible, séparation des métaux et du verre, variation dans la forme et l'humidité du combustible ainsi que la nécessité de changement rapides du combustible pour créer des opportunités de marché. Le système d'alimentation en combustible du gazogène doit donc être conçu de façon adéquate pour éviter ces problèmes.

Il existe cinq types principaux de systèmes permettant d'alimenter en biomasse le gazogène à lit fluidisé à bulles [8] :

- Chute par gravité ;
- Convoyeur à vis ;
- Pulvérisateur ;
- Injection pneumatique ;
- Fente amovible.

Le système de chute par gravité (figure 2.9) permet à la biomasse d'être acheminée au gazogène sans effort mécanique. Cette technologie se caractérise par sa simplicité de conception. Cependant, ce système nécessite que la pression interne du gazogène soit inférieure à la pression atmosphérique ambiante afin d'éviter le retour des gaz et des particules fines dans la chute, pouvant ainsi causer des incendies. Afin d'éviter les étranglements, le combustible doit être très fin. Bien que cette technologie permette un excellent mélange du combustible dans le gazogène, il se crée des zones de pression et de chaleur élevé près de l'entrée, ce qui engendre des problèmes de corrosion et de

fatigue prématurée des matériaux. De plus, les températures élevées peuvent faire coller la biomasse sur les parois du conduit d'alimentation, entraînant alors des blocages qui impliquent d'arrêter le réacteur. Il est donc nécessaire d'injecter de l'air près de l'entrée afin de disperser le combustible.

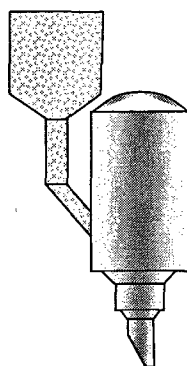


Figure 2.9: Chute par gravité

Le système de convoyeur à vis est une vis d'Archimède permettant d'acheminer le combustible directement dans le gazogène (figure 2.10). Ce système présente l'avantage de pouvoir acheminer la biomasse d'une zone à pression basse vers une zone à pression élevée. De plus, il est possible de mesurer la quantité de biomasse transférée au gazogène.

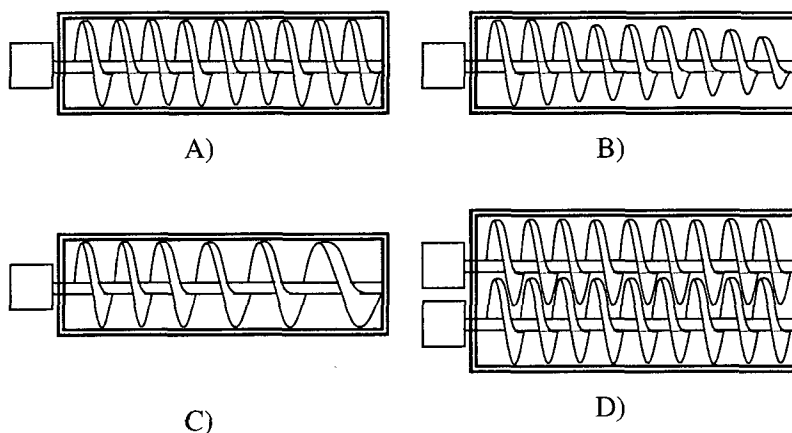


Figure 2.10: Différentes configuration de convoyeur à vis. A) Vis simple B) Diamètre des filets variable C) Densité de filets variable D) Multiples vis

La vitesse de rotation permet de varier le taux d'alimentation. Comme la chute par gravité, la dispersion de la biomasse est limitée avec ce système, ce qui peut engendrer des zones à température élevée près de l'entrée de la biomasse. Un jet d'air de dispersion doit donc être utilisé. Il arrive parfois que le combustible soit comprimé entre les filets et empêche la rotation de la vis. Trois solutions permettent de remédier à ce problème : variation de la densité des filets le long de l'axe, variation du diamètre des filets et utilisation de vis multiples.

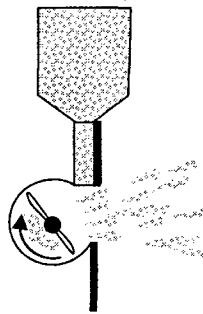


Figure 2.3: Système d'alimentation par pulvérisation [8]

Le système de pulvérisation permet au combustible d'être dispersé à l'entrée du gazogène, ce qui évite les zones de température extrême. Ce système se caractérise par des pales rotatives qui projettent la biomasse. Ce système ne permet cependant pas de mesurer la quantité de biomasse entrante dans le réacteur.

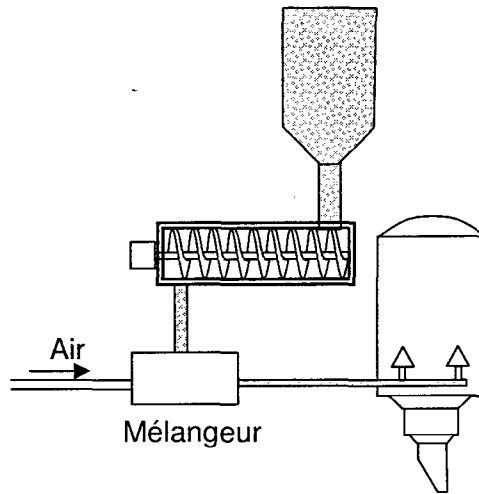


Figure 2.12: Système d'injection pneumatique

Le système d'injection pneumatique permet d'introduire le combustible en même temps que l'air utilisé pour la combustion. Le combustible est mélangé à l'air et est introduit à vitesse élevée dans le réacteur. Cette technique nécessite une biomasse de diamètre très petit. Le mélange du combustible à l'air constitue l'un des problèmes majeurs de cette technique. Le débit d'air élevé entrant dans le gazogène entraîne des problèmes d'érosion due au frottement. Des capuchons peuvent être utilisés à l'entrée du jet dans le gazogène afin de limiter l'érosion.

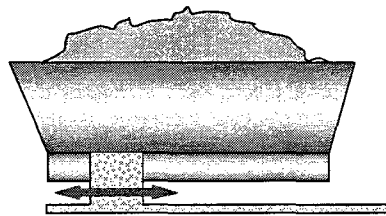


Figure 2.4: Fente amovible

Le système de fente amovible [4] est une technologie intéressante pour les combustibles ne se mouvant pas facilement ou qui peuvent se compacter, limitant ainsi leur déplacement. Ce système permet d'éviter les problèmes de la chute par gravité et du convoyeur à vis. Une fente entraînée mécaniquement se déplace en bas du conteneur de

biomasse, la biomasse tombe donc naturellement par gravité dans la fente et est acheminée directement au gazogène.

2.6 Avantages et inconvénients des gazogènes

Le tableau 2.9 résume les avantages et les inconvénients de chaque type de gazogène. Les caractéristiques des différents types de gazogènes sont résumées en annexe 5.

Tableau 2.9: Avantages et inconvénients des 5 principaux types de gazogènes [16]

Gazogène	Avantages	Inconvénients
Co-courant	Simple de conception et éprouvé pour certains combustibles	Combustible homogène et de taille significative
	Simple de construction	Taille des installations très limitée (350 kWe)
	Taux de conversion élevé	Possibilité de fusion des cendres dans la grille du réacteur avec blocage
	Gaz relativement propre si combustible approprié	Faible humidité des combustibles nécessaire
	Coût de maintenance élevé (usure)	
Contre courant	Construction simple et robuste	Température des gaz faible en sortie avec risque de condensation
	Rendement thermique élevé	Gaz très chargé en goudrons
	Plus grande souplesse vis à vis de l'humidité de la matière première	Inadapté à la production d'électricité
Lit fluidisé à bulles	Bon contrôle des températures	Taille minimale pour être économique (20 MWe)
	Vitesses de réaction élevée	Taux de particules dans les gaz élevé
	Bon contact solide/gaz	Pertes de C avec cendres par entraînement limitant les rendements
	Construction relativement simple et opérationnelle	Nécessite des particules de faible taille
	Pas de limite de taille	Humidité faible <20%
	Traitement catalytique dans le lit possible	Sensible à la répartition granulométrique
	Taux goudrons modéré à élevé	Carbone non converti entièrement
Lit fluidisé	Bon contrôle de température et vitesse de réaction	Taux de particules dans les gaz élevé

circulant	Grande tolérance par rapport au combustible (type, taille)	Humidité faible < 20%
	Taux goudrons dans les gaz modérés	Taille minimale pour être économique : 20 MWe
	Taux de conversion élevé	Perte de C avec les cendres
	Pas de limite de taille	Nécessite des particules de faible taille pour bénéfice optimal des propriétés
Lit entraîné	Bon contact gaz solide et mélange	Coût préparation biomasse élevé
	Vitrification des cendres	Haute température donne gaz de qualité mais faible PCI
	Pas de limite de taille	Inventaire des combustibles limité
	Taux de conversion élevé	Très forte taille minimale (>50 MWe)
	Gaz propre par rapport aux goudrons	

2.7 Défis et difficultés techniques

Plusieurs obstacles peuvent compliquer la rentabilité économique et la faisabilité technique de l'implantation des unités de gazéification à l'échelle industrielle. Les problèmes généralement relatés dans la littérature sont :

- La conversion du CH_4 , goudron et autres hydrocarbures en H_2
- La suppression du goudron contenu dans le gaz de synthèse pour une utilisation dans les turbines à gaz ou pour l'obtention d'un gaz de synthèse pur
- Le nettoyage des gaz obtenus par la gazéification des déchets divers

Plusieurs difficultés techniques sont relatées dans la littérature au niveau des deux réactions principales ayant lieu dans le gazogène.

Tableau 2.10: Difficultés relatives à la pyrolyse et à la gazéification [8]

Pyrolyse	Gazéification
Manipulation des huiles lourdes issues de la pyrolyse : <ul style="list-style-type: none"> - toxicité - stabilité - entreposage - transport 	Nettoyage des gaz et conditionnement : <ul style="list-style-type: none"> - Conversion catalytique - Nettoyage par condensation - Nettoyage sans condensation - Procédés à haute température
Valorisation commerciale des sous produits de réactions : <ul style="list-style-type: none"> - selon les critères de l'industrie 	Élimination et/ou valorisation du goudron : <ul style="list-style-type: none"> - Compréhension de la chimie du goudron - cassage du goudron par procédés chimiques, physiques
Propriété des produits de réaction : <ul style="list-style-type: none"> - Acidité - Cendres 	Design du gazéificateur (grosueur vs puissance & intrants, débits, conditions optimales de fonctionnement) Conditionnement du combustible : séchage, broyage, séparation des éléments indésirables Utilisation et synthèse du gaz de synthèse : <ul style="list-style-type: none"> - Obligations en termes de décontamination - Séparation des gaz - Composition du gaz Intégration entre les procédés chimiques Automatisation des procédés : contrôle et capteurs.

2.8 Les avantages et les inconvénients de la gazéification

Les technologies de gazéification ont fait l'objet d'un intérêt croissant ces dernières dans les pays industrialisés. En effet, plusieurs facteurs réunis, tels que la demande croissante en énergie et la protection de l'environnement justifient l'intérêt envers cette technologie. Les projets de gazéification comportent des avantages et inconvénients au niveau socio-économiques et techniques.

2.8.1 Aspects socio-économiques

L'implantation d'un projet de gazéification apporte de nombreux bénéfices sociaux au plan de l'économie locale, la gestion des déchets, la santé publique et la gestion des forêts et des cultures. Le tableau 2.11 résume quelques bénéfices socio-économiques qu'apporte une technologie de gazéification à une communauté.

Tableau 2.11: Aspects socio-économiques [13]

Création d'emplois directs : centrale de gazéification, techniciens, opérateurs, ingénieurs
Création d'emplois indirects : transport de la matière première, culture de la biomasse
Meilleure gestion des matières résiduelles; détournement de celles-ci des sites d'enfouissement
Remplacement des incinérateurs : diminution des polluants atmosphérique, plus grande efficacité énergétique
Chauffage urbain : chauffage des bâtiments à moindre coûts
Meilleure gestion des forêts et des cultures

2.8.2 Aspects techniques

Le tableau 2.12 résume les avantages et inconvénients de la gazéification de la biomasse au niveau technique.

Tableau 2.12: Avantages et inconvénients de la gazéification de la biomasse [16]

Avantages	Inconvénients
Efficacité du procédé plus efficace que la combustion directe du combustible original : plus d'énergie est extraite du combustible.	Apparition de goudron sur les pièces du système. Le goudron est un problème majeur et les technologies pour l'éliminer ne sont pas encore au point.
Élimination des déchets municipaux : procédé plus propre et plus efficace que l'incinération. Permet de réduire la quantité de déchets allant dans les dépotoirs.	Nécessité de nettoyer le gaz produit si celui-ci doit être refroidi pour éviter la condensation du goudron
Le syngaz peut être brûlé directement dans les moteurs à combustion par combustion directe ou co-combustion.	Le pouvoir calorifique du gaz obtenu est relativement faible, soit 12% de celle du gaz naturel
Dans un cycle combiné de gazéification (IGCC), la production d'énergie électrique est plus grande que pour la production par les centrales conventionnelles au charbon.	La combustion du syngaz produit par la gazéification produit du dioxyde de carbone. Des technologies de captage peuvent donc être nécessaire dans le cas d'un projet à « zéro émission de CO ₂ ».
Le syngaz peut-être utilisé pour produire une multitude de produits chimiques à haute valeur ajoutée (\$)	La culture intensive des terres pour la production de biomasse peut être dommageable (engrais, stress environnemental, appauvrissement des sols, cultures uniques, etc)
Le syngaz peut être converti en combustible synthétique via les procédés Fischer-Tropsch (similaire au diesel) et Sabatier (méthane).	L'énergie de la biomasse est dispersée sur de larges surfaces; nécessité de grandes surfaces de cultures pour la production d'énergie à grande échelle
Les résidus de réaction, les cendres, sont propres (si biomasse=bois) et peuvent être utilisées comme fertilisants.	Si la source d'approvisionnement est à une distance au-delà de 100 km, le rapport énergie nécessaire pour le transport / énergie disponible devient grand.
Les intrants peuvent être des matériaux qui ne sont généralement pas des combustibles utiles (biomasse, déchets organiques).	Le coût de production de l'énergie demeure plus grand que pour les énergies fossiles.
La gazéification peut être utilisée à l'échelle industrielle pour produire de l'électricité.	La gazéification des déchets peut faire perdre l'intérêt pour le recyclage et la réduction des déchets.
La biomasse en tant qu'intrant dans le procédé est la première source en importance en termes de quantité et d'accessibilité.	Source d'énergie locale seulement, l'énergie produite ne peut être exportée.
La gazéification de la biomasse est considérée comme une des voies les plus prometteuses permettant d'atteindre les exigences du protocole de Kyoto.	Le coût de production dépend fortement du coût de la matière première.
La gazéification de la biomasse permet de fermer le cycle du carbone : la gazéification de la biomasse ne produit davantage de CO ₂ dans l'atmosphère puisque le CO ₂ généré provient du carbone emmagasiné par la biomasse.	La maturité de la technologie en fait des projets à hauts risques qui nécessitent des investissements publics.

<p>Combiné avec un autre combustible, la gazéification de la biomasse permet de remplacer le combustible fossile par le gaz synthétique, pendant la période où la biomasse est disponible.</p>	<p>Les infrastructures d'approvisionnement en biomasse ne sont pas encore en place; nécessité de politiques claires en matière de gestion de la biomasse.</p>
<p>La gazéification pourrait être un moyen de valoriser les forêts et les terres du Québec.</p>	<p>Méconnaissance du public envers la technologie; souvent confondue avec l'incinération.</p>
<p>La biomasse est uniformément répartie sur le territoire : facilité d'approvisionnement.</p>	<p>Pas de législation pour la gazéification; confusion quant aux limites d'émission.</p>
<p>Résidu solide plus stable que celui de l'incinération.</p>	<p>Le procédé exige un taux d'humidité entre 15-30% pour la biomasse.</p>
	<p>Les matières organiques doivent être triées et broyées.</p>

3 Modélisation de la gazéification de la biomasse en lit fluidisé

3.1 *Revue de littérature*

La gazéification en lit fluidisé est un procédé comportant de nombreux phénomènes qu'il convient de prendre en compte dans l'élaboration de modèles mathématiques. De nombreux phénomènes importants ont lieu :

- Hydrodynamique de fluidisation ;
- Cinétiques de réaction en phase gazeuse ;
- Cinétiques de réaction gaz-solide ;
- Transferts de matière ;
- Mélange des particules dans le lit ;
- Échanges de chaleur ;

La modélisation s'avère donc le seul moyen de résoudre les systèmes complexes étant donné le nombre de variables impliquées. De plus, le fait d'utiliser une simulation qui génère de l'information décrivant le comportement avec un degré raisonnable de déviation par rapport aux conditions réelles d'opération est un avancement considérable dans la compréhension des phénomènes impliqués et de la cohérence de la structure mathématique utilisée.

Il existe quelques modèles mathématiques tentant de simuler les phénomènes impliqués dans un lit fluidisé dans lequel surviennent des réactions de gazéification. Chacune de ces classes de modèles découlent d'hypothèses simplificatrices et présentent divers degrés de précision, des limites, avantages et inconvénients. Les modèles plus complexes proviennent dans tous les cas de modèles simples qui ont été raffinés au fur et à mesure que les expériences ont été réalisées.

Tous les modèles sont composés d'équations phénoménologiques basées sur des variables mesurables telles que :

- Débits ;
- Compositions ;
- Températures ;
- Pression ;

La modélisation s'appuie sur la mise en équation des phénomènes physiques impliqués et ceux-ci sont reproduits à l'aide de modèles phénoménologiques basés sur les:

- Équations fondamentales de la thermodynamique (masse, énergie, quantité de mouvement) ;
- Équations constitutives basées sur des corrélations empiriques ou semi-empiriques.

La combinaison de ces équations mène généralement à une modélisation valide des phénomènes impliqués. Cependant, la modélisation est limitée aux intervalles de validité des équations constitutives.

Les grandes classes de modèles [17] sont les suivants : modèles d'équilibre, modèles 0-D, 1-D, 2-D, 3-D et n-D.

Les modèles d'équilibre impliquent que le réacteur opère en régime permanent mais ceux-ci impliquent que le réacteur ait les mêmes conditions le long de l'axe du réacteur, ce qui n'est pas le cas en condition réelle d'opération. Certaines études [18, 19] font état de résultats concluants en utilisant cette approche. Cette méthode consiste à minimiser l'énergie libre de Gibbs afin de déterminer l'équilibre des réactions chimiques

impliquées. Li [19] (2000) a développé un modèle permettant de déterminer la concentration des gaz dans le réacteur pour deux types de charbon. Cependant le modèle ne prend pas en compte la présence des particules et l'hydrodynamique du lit fluidisé. Le modèle élaboré par Nikoo (2008) intègre un modèle d'équilibre dans ASPEN [20]. Les résultats de simulation approchent de façon qualitative les tendances observées dans les expériences. Le modèle présente un écart d'environ 15% par rapport aux valeurs expérimentales.

Les modèles à zéro dimension (0-D) sont simples à mettre en œuvre mais cependant l'équilibre n'est pas pris en compte puisque ceux-ci n'incluent pas les vitesses, températures ou profils de concentration ; ceux-ci conduisent donc dans certains cas à des résultats erronés et comportent de sérieuses limitations dans l'interprétation des résultats [21-23].

Les modèles à une dimension (1-D) représentent une amélioration considérable par rapport aux modèles 0-D étant donné que ceux-ci ne nécessitent plus les hypothèses d'équilibre et qu'ils prennent en compte les profils axiaux de température, de vitesse et de concentration [24]. Ces modèles donnent une quantité riche d'information qualitative et quantitative présentant un degré de précision acceptable [25-27].

Les modèles à deux dimensions (2-D) deviennent utiles lorsque des échanges importants de chaleur avec l'extérieur ont lieu [28] et lorsque la dimension radiale est non négligeable. Les échanges thermiques impliquent des différences de température près des parois, ce qui se traduit par des compositions différentes par rapport aux modèles 1-D. Cependant, étant donné la faible épaisseur de la couche limite, le fait de négliger la faible variation radiale de température s'avère être une approximation valide qui ne justifie pas l'utilisation d'un modèle 2D pour un réacteur isolé.

Les modèles en trois dimensions (3-D) sont surtout utilisés pour les géométries complexes et les mouvements complexes des gaz et dans l'étude de divers types de régime de fluidisation et d'alimentateurs tels que les pulvérisateurs [29]. Ce type de modèle est complexe à résoudre puisqu'il nécessite de résoudre les équations de Navier-Stokes et de prendre en compte toutes les conditions aux frontières propres à la géométrie complexe. Le niveau de détail obtenu n'est pas d'une grande utilité dans l'opération des réacteurs industriels. Cependant, ils permettent une meilleure compréhension des phénomènes d'échange. Gräbner (2007) a modélisé les trajectoires et les flux des particules de charbon, les profils de réactions chimiques en trois dimensions pour un réacteur à lit fluidisé [30]. La modélisation en trois dimensions a été utilisée par Yang (2004) pour étudier la gazéification sous-terrainne des mines de charbon [31]. Sadaka (2002) a démontré l'importance du nombre de points d'entrée d'air et la présence de plumes à haute température près des entrées d'air pour les combustibles à grande volatilité [32]. Oevermann (2009) a réalisé un modèle élaboré permettant de simuler dans l'espace et dans le temps la gazéification du bois dans un lit fluidisé à bulles [33]. Le modèle prend en compte les phases chimiques, les réactions de pyrolyse et de gazéification des particules individuelles ainsi que les transferts de masse et d'énergie entre les phases solides et gazeuses.

Les modèles à n dimensions (n -D) intègrent généralement le temps. Bien que la plupart des réacteurs fonctionnent en régime permanent, l'information temporelle peut être utile pour déterminer les changements ayant lieu dans le réacteur lorsque celui-ci démarre ou s'arrête.

De par les avantages mentionnés, la littérature fait état d'une quantité importante de modèles 1-D présentant des adaptations particulières en fonction des types de biomasse à traiter et divers degrés de raffinement. Plusieurs modèles à une dimension prenant en compte les cinétiques de réaction et l'hydrodynamique ont été proposés afin de simuler les phénomènes ayant lieu dans un lit fluidisé à bulles. L'utilisation d'un

modèle 1D a été initialement utilisée par Buekens (1985), cependant l'hydrodynamique n'est pas prise compte [34]. Kunii et Levenspiel (1991) font état d'une liste exhaustive et détaillée des modèles hydrodynamiques ayant lieu dans un réacteur à lit fluidisé [35]. Plusieurs modèles ont par la suite tenté d'intégrer les cinétiques de réaction et l'hydrodynamique. L'approche mathématique la plus couramment utilisée est un modèle à deux phases prenant en compte la présence des bulles (phase bulles) au travers du lit (phase émulsion). Parmi les modèles à deux phases, deux ont retenu l'attention, soit le modèle à bulles de Kunii et Levenspiel (1991) et le modèle d'assemblage de bulles proposé par Kato et Wen [35, 36]. Cette approche est détaillée explicitement dans divers ouvrages [7, 37, 38] et plusieurs études font état de résultats reproduisant assez fidèlement les conditions expérimentales [39, 40]. Hamel et Krumm (2002) ont utilisé cette approche pour simuler plusieurs types de réacteurs opérant dans diverses conditions [41]. Ce type d'approche a permis de prédire avec succès la composition du gaz de synthèse pour des combustibles autres que la biomasse [42].

La validité des cinétiques de réaction a été étudiée par Corella et al. (2001) [43]. Ces derniers ont intégré dans leur modèle la gazéification à la vapeur. Une revue de littérature approfondie des cinétiques de réaction pour les réactions $C + O_2$, $C + H_2O$ et $C + CO_2$ a été réalisée par Di Blasi (2009) qui a fait état de cinétiques de réactions très différentes en fonction du type de biomasse et des conditions thermodynamiques [44]. De Souza-Santos (1987) a développé un modèle complet et largement documenté reproduisant avec une bonne précision les résultats expérimentaux [17]. Ce modèle est utilisé pour simuler un lit fluidisé et est disponible en version commerciale. Des modèles intégrant les réactions de séchage, pyrolyse, d'oxydation et de gazéification ont été proposées [7, 45, 46]. Cependant il a été démontré que les réactions de pyrolyse et de séchage ont lieu avant que la biomasse n'entre dans le réacteur [7, 26, 47, 48]. Ainsi les conditions initiales du modèle ont une base expérimentale et proviennent de la composition des gaz issus de la volatilisation.

La modélisation du mélange des particules a un impact sur les réactions et plusieurs approches ont été proposées. Deux approches ont été largement utilisées avec un assez bon degré de précision ; le mélange par diffusion initialement introduit par May (1959) [49] et le mélange à contre-courant (CCBM) [49-51] initialement introduit par Van Deemter (1967) [52]. Une troisième approche, la méthode de Soo (1989) a été utilisée avec succès par De Souza-Santos (1989) [53]. Cependant, cette dernière méthode est beaucoup plus compliquée à mettre en œuvre mais elle s'approche davantage des taux de circulation de particules observés en pratique. Une étude comparative a permis de démontrer que le modèle CCBM et celui par diffusion donnent des résultats fiables et similaires. Cependant le modèle CCBM est plus robuste que celui par diffusion car il est une représentation phénoménologique du mélange des particules. Radmanesh (2005) a étudié l'effet de la température sur le coefficient d'échange à l'aide de traceurs radioactifs et a démontré que celui-ci change en fonction de la température [51]. Radmanesh (2006) a intégré dans son étude le modèle CCBM couplé avec le modèle à deux phases [9]. Les résultats obtenus se rapprochent des résultats expérimentaux. Peijun Ji (2008) a utilisé avec succès la méthode de Radmanesh dans un procédé comprenant un lit fluidisé, un reformeur de vapeur et une membrane *water-gas-shift* pour produire de l'hydrogène ultra pure par gazéification [54].

Les cinétiques de réactions ont été largement documentées. Étant donné le rôle prédominant de la réaction *water-gas shift*, Callaghan (2006) a réalisé une thèse de doctorat contenant une revue de littérature très détaillée sur les différentes cinétiques de réactions et les modèles utilisés [55].

Des études thermodynamiques permettant de déterminer les bilans énergétiques et les équations stœchiométriques empiriques permettent de déterminer les rapports d'équivalence et les ratios nécessaires de combustible par rapport aux débits d'agent fluidisant. Zhu (2005) [56] a vérifié la relation empirique de Van Corven (2002) pour vingt-huit combustibles gazeux, liquides et solides et gazeux et a établi une relation

empirique entre le pouvoir calorifique supérieur et le coefficient stœchiométrique [57]. L'étude compare trois méthodes différentes pour calculer le rapport d'équivalence. Channiwala (2002) a développé une relation empirique permettant de déterminer la valeur calorifique de combustibles solides, liquides et gazeux à partir de leur composition élémentaire respective [58]. Rao (2003) a réalisé une étude des bilans de masse, d'énergie et d'exergie pour des déchets urbains et des copeaux de bois et a établi les relations chimiques stœchiométriques de gazéification pour différents combustibles [59]. Les prédictions de son modèle approchent avec un bon niveau de précision les résultats expérimentaux. L'étude thermodynamique détaillée permet de quantifier les sources d'inefficacité et d'irréversibilités dans le procédé. D'autres études ont permis de déterminer les paramètres d'évaluation de la performance des réacteurs [60-62].

3.2 Problèmes

La plupart des études s'intéressent à des aspects particuliers de la gazéification et de la fluidisation. La plupart des recherches en gazéification ne touchent qu'à la gazéification du charbon et des résidus agricoles mais peu s'intéressent à la gazéification des copeaux de bois. De plus, peu de modèles proposés intègrent le couplage de tous les aspects suivants pour la gazéification du bois :

- l'hydrodynamique à haute température ;
- cinétiques de réaction hétérogènes et homogènes ;
- présence de deux phases (bulles et émulsion) ;
- mélange des particules dans le lit ;
- deux zones dans le réacteur : le lit de sable et une zone d'emportement ;
- effet du rapport d'équivalence et de la valeur calorifique du gaz de synthèse ;

Étant donné le stade encore expérimental de la gazéification, très peu de données sont disponibles dans la littérature au niveau de la présence de polluants atmosphérique dans

le gaz de synthèse et aucune donnée n'est disponible quant au potentiel du bardeau d'asphalte en tant que combustible.

3.3 Objectifs

Compte tenu des lacunes dans la compréhension des phénomènes impliqués dans la gazéification, l'objectif du projet de recherche est de développer un modèle phénoménologique de simulation de la gazéification de la biomasse en lit fluidisé à bulles.

3.4 Méthodologie

La résolution des systèmes d'équations différentielles non linéaires couplées aux équations d'hydrodynamique doit être résolue à l'aide de Matlab et des bibliothèques de fonctions de résolution des équations différentielles. Les résultats des simulations informatiques sont ensuite validés aux résultats expérimentaux et autres études similaires. Le schéma de réalisation suivant illustre la méthodologie expérimentale employée.

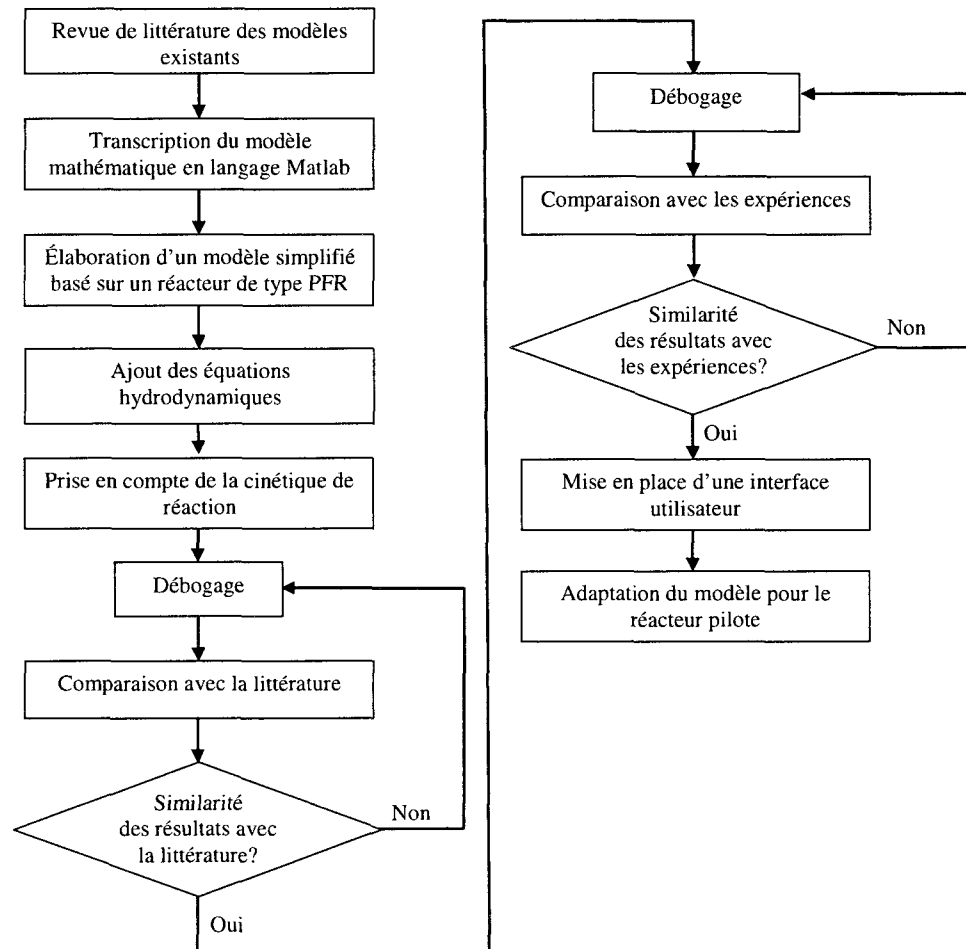


Figure 3.1: Organigramme de réalisation du modèle informatique

4 Description mathématique du modèle

4.1 Organisation du modèle

La résolution mathématique est réalisée selon la séquence suivante.

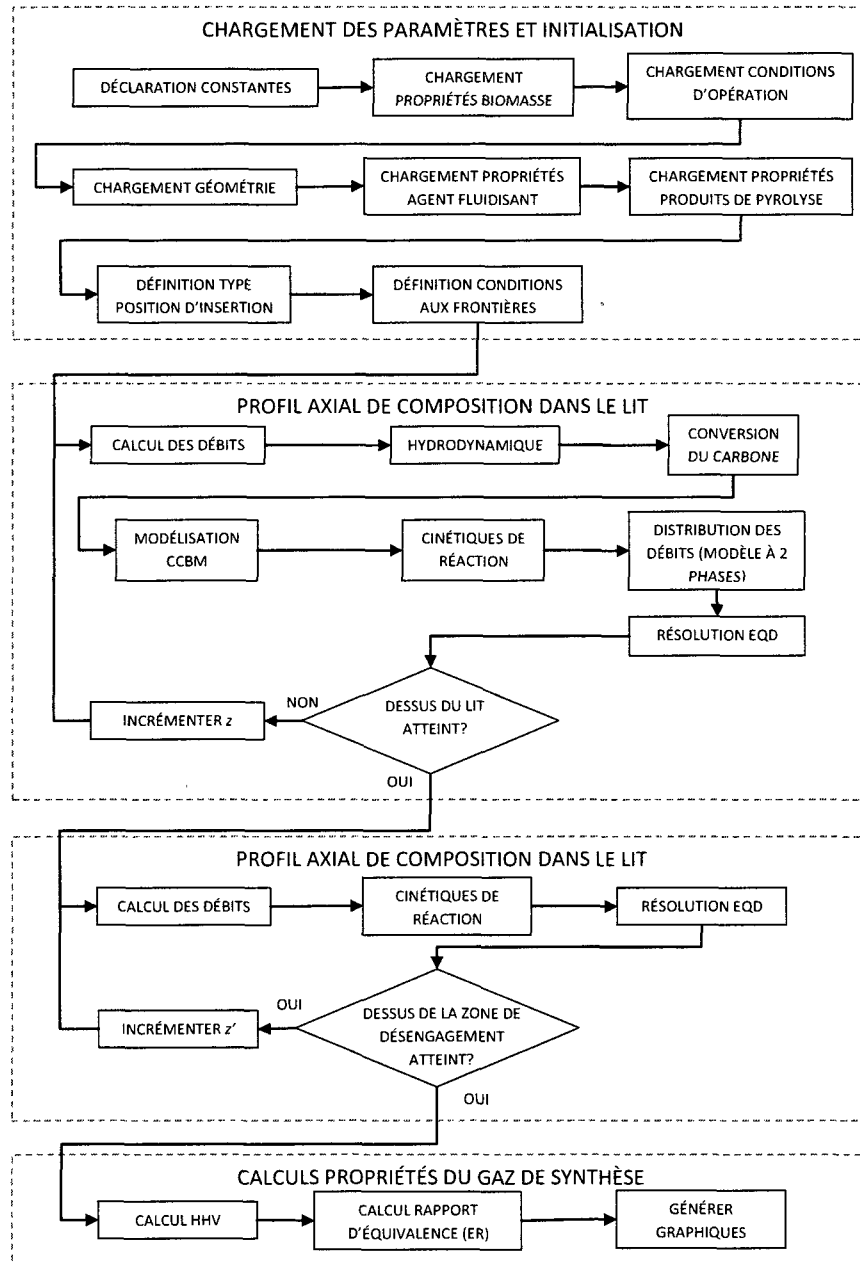


Figure 4.1 : Schéma de résolution du modèle mathématique

4.2 Hypothèses du modèle

Il est nécessaire de poser des hypothèses [9, 17] afin de simplifier la complexité du problème :

1. Le lit est composé de deux phases : une phase émulsion et une phase bulles ;
2. Les bulles ne sont constituées que de gaz, la fraction de solide est négligeable pour le lit fluidisé à bulles ;
3. Tous les solides sont dans la phase émulsion ;
4. Le réacteur fonctionne en régime permanent. Les débits de gaz et de solide sont donc constants ;
5. Le réacteur de type PFR (plug flow regime) est utilisé pour modéliser les flux de gaz dans chacune des deux phases dans le lit et dans la zone d'empatement. Une interface imaginaire est utilisée pour prendre en compte l'échange de matière entre les deux phases dans le lit. La surface totale de cette interface est égale à la surface totale des bulles à un instant donné dans le lit ;
6. Le problème est réduit à une dimension : les variations observées n'ont lieu que dans la dimension axiale ;
7. Les termes de 2^e degré dans l'équation de transport ont été négligés. En effet, les transferts de masse par diffusion et le transfert d'énergie par conduction sont négligeables par rapport au terme de convection ;
8. La composition des particules dans le lit est considérée comme étant homogène. Le flux de particules est assez élevé pour justifier cette assumption ;
9. Le carbone est assumé comme étant le seul constituant des particules solides ;
10. La pyrolyse [7] est considérée comme ayant lieu instantanément dans la zone d'alimentation. Conséquemment, la condition à la frontière à l'entrée du lit est égale à la composition issue de la pyrolyse.
11. Le lit est considéré isotherme. Une bonne isolation du lit et un bon mélange des particules justifie cette hypothèse.
12. Le mélange des particules dans le lit est modélisé par le modèle CCBM.

13. Le changement de la morphologie des particules dans le lit n'affecte pas le coefficient de transfert de masse K_w . En effet, ce coefficient est davantage affecté par l'hydrodynamique et la grosseur des particules.
14. La phase émulsion est dans les conditions de fluidisation minimale au niveau du distributeur. En effet, le modèle à deux phases implique que la phase émulsion est dans les conditions de fluidisation minimale ($\varepsilon_e = \varepsilon_{mf}$). Cependant, des études [35, 63] ont démontré que la phase émulsion s'écarte des conditions minimales de fluidisation à mesure que la distance augmente par rapport au distributeur. Le modèle à deux phases est donc abandonné au-delà de la zone du distributeur.

4.3 Vitesses critiques de fluidisation

Le régime du lit fluidisé à bulles survient lorsque le débit de gaz excède le débit nécessaire pour soulever le poids du lit. En d'autres mots, lorsque la vitesse du gaz dépasse la vitesse critique appelée vitesse de fluidisation minimale (u_{mf}), le lit se comporte comme un liquide. La force de traînée exercée par le fluide sur le lit de particules s'écrit :

$$F_D = \Delta PA = AL(1 - \varepsilon)(\rho_P - \rho_G)g \quad \text{Eq. 1}$$

Où A et L sont la section et la hauteur du lit, respectivement. Sachant la différence de pression de part et d'autre du lit, la porosité du lit peut être déterminée en isolant le terme de porosité ε .

La vitesse minimale de fluidisation s'obtient en isolant le terme u_{mf} dans la définition du nombre de Reynolds :

$$u_{mf} = \frac{Re_{mf}\mu_g}{d_p\rho_g} \quad \text{Eq. 2}$$

Le nombre de Reynolds à la vitesse minimale de fluidisation s'écrit [35, 64, 65] :

$$Re_{mf} = \frac{u_{mf}d_p\rho_g}{\mu} = [a_1^2 + a_2^2 N_{ar}]^2 - a_1 \quad \text{Eq. 3}$$

Où a_1 et a_2 sont donnés par 27.2 et 0.0408. Le nombre d'Archimède est donné par :

$$N_{ar} = \frac{\rho_g(\rho_p - \rho_g)gd_p^3}{\mu_g^2} \quad \text{Eq. 4}$$

Où d_p est le diamètre *moyen* des particules et peut être égal au diamètre d'ouverture du tamis et μ_g est la viscosité dynamique *moyenne* du mélange gazeux [66] dû à la présence de réactions chimiques qui impliquent une non uniformité axiale de la viscosité dynamique du gaz (en l'absence de réactions chimiques, une viscosité dynamique constante peut être assumée). La présence de nombreux types de particules (sable, biomasse, catalyseurs, etc.) implique une masse volumique moyenne ρ_p .

Selon le diamètre des particules, quatre groupes de lits fluidisés à bulles sont définis (voir table A1.3 dans [67]). Pour les groupes B et D, l'excès du débit de gaz implique l'apparition de bulles à la base du lit et le volume de celles-ci augmente lors de leur ascension vers la surface du lit. La suspension gaz-solide autour des bulles dans le lit est appelée la phase émulsion. La vitesse superficielle du gaz dans cette phase est du même ordre que la vitesse minimale de fluidisation u_{mf} . La porosité à vitesse minimale de fluidisation est ε_{mf} . Le lit fluidisé à bulles du groupe A ne commence pas à buller lorsque la vitesse superficielle U excède u_{mf} , celui-ci prend plutôt de l'expansion jusqu'à ce que la vitesse atteigne une autre valeur critique appelée vitesse minimale de

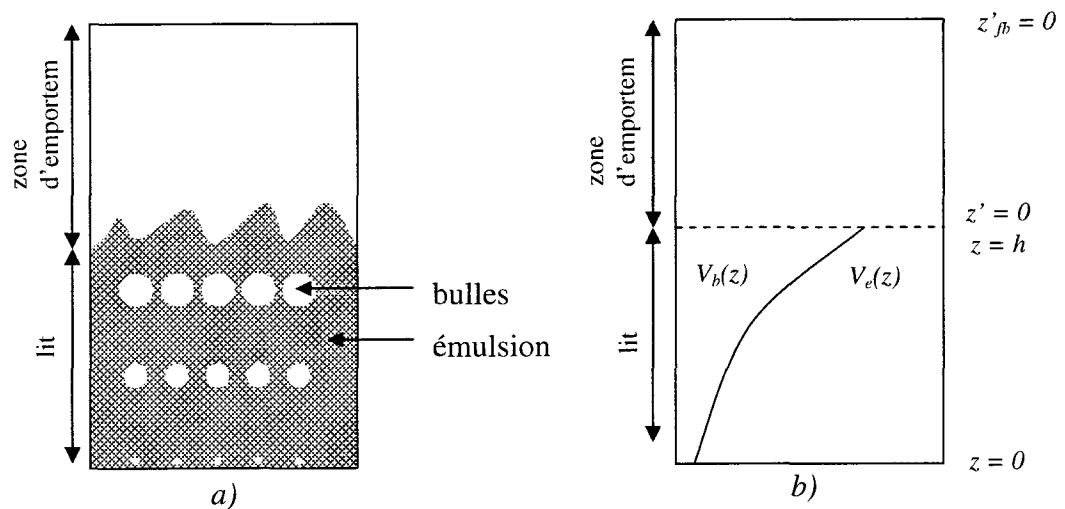
bulle, u_{mb} . Cette vitesse est donnée par la relation d'Abrahamsem et Geldart (1980) [67] :

$$u_{mb} = 2.07 e^{0.716F} \langle d_p \rangle \left[\frac{\rho_g^{0.06}}{(\mu)^{0.347}} \right] \quad \text{Eq. 5}$$

Où F est la fraction de particules dont le diamètre moyen est inférieur à $45 \mu\text{m}$, d_p est le diamètre moyen des particules (diamètre d'ouverture du tamis), ρ_g est la densité du gaz en kg/m^3 et μ est la viscosité dynamique du gaz en $\text{kg/m}\cdot\text{s}$.

4.4 Hydrodynamique de fluidisation

Le réacteur à lit fluidisé contient des particules solides et des gaz. La formation des bulles au niveau du distributeur et qui grossissent en montant a un impact sur l'hydrodynamique et les réactions chimiques. La figure 4.2 illustre le phénomène (a) ainsi que la partie du volume occupée par la phase bulle et la phase émulsion.



4.4.1 Description du modèle à 2 phases

Le schéma suivant illustre le concept du modèle à deux phases à une dimension, lequel présuppose un échange entre les deux phases au niveau d'une interface imaginaire entre les deux phases.

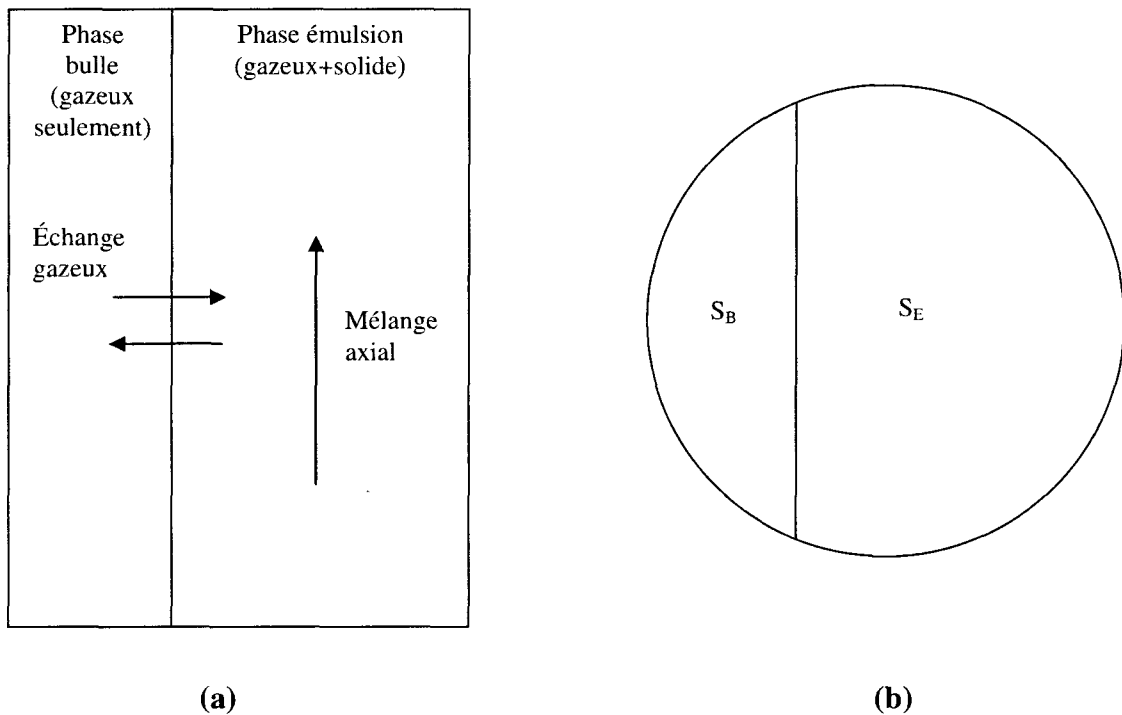


Figure 4.3: Schéma conceptuel du modèle à deux phases présentant le volume occupé par les deux phases à une hauteur donnée. (a) Coupe axiale du modèle à deux phases (b) Coupe radiale du modèle à deux phases présentant les deux surfaces occupées par les deux phases.

Le modèle tente de résoudre sur l'axe z les débits massiques de gaz de la phase émulsion (F_E) et la phase bulle (F_B) pour chaque composant i . La conservation du débit molaire implique que le débit de gaz en tout point sur l'axe z est distribué entre la phase émulsion et la phase bulle :

$$F_g = F_e + F_b \quad \text{Eq. 6}$$

La fraction molaire de chacune des deux phases est donnée par :

$$y_e = \frac{F_e}{F_g} \quad \text{Eq. 7}$$

$$y_b = \frac{F_b}{F_g} \quad \text{Eq. 8}$$

La fraction molaire des constituants dans chacune des deux phases est donnée par :

$$y_{i,e} = \frac{F_{i,e}}{F_g} \quad \text{Eq. 9}$$

$$y_{i,b} = \frac{F_{i,b}}{F_g} \quad \text{Eq. 10}$$

La fraction molaire d'un constituant dans le mélange gazeux est alors donné par :

$$F_{i,g} = F_g (y_{i,e} + y_{i,b}) \quad \text{Eq. 11}$$

À une hauteur donnée, il est possible de déterminer la composition du gaz. Cette composition est utilisée pour déterminer la condition à la frontière pour le calcul des équations pour la zone de désengagement. La fraction molaire d'un constituant i dans le mélange gazeux s'écrit :

$$y_{i,g} = \frac{F_{i,e} + F_{i,b}}{F_g} \quad \text{Eq. 12}$$

En base molaire, la densité moyenne du gaz et la densité du gaz dans les deux phases s'écrit :

$$C_g = \frac{P}{RT} \quad \text{Eq. 13}$$

$$C_e = C_g y_e \quad \text{Eq. 14}$$

$$C_b = C_g y_b \quad \text{Eq. 15}$$

Pour un composé spécifique i , les relations précédentes s'écrivent :

$$C_{i,g} = C_g y_{i,g} \quad \text{Eq. 16}$$

$$C_{i,e} = C_g y_{i,e} \quad \text{Eq. 17}$$

$$C_{i,b} = C_g y_{i,b} \quad \text{Eq. 18}$$

En base massique, la densité pour un gaz i dans le mélange gazeux, la phase émulsion ou la phase bulles s'écrit respectivement :

$$\rho_{i,g} = C_g y_{i,g} M_i = C_{i,g} M_i \quad \text{Eq. 19}$$

$$\rho_{i,e} = C_g y_{i,e} M_i = C_{i,e} M_i \quad \text{Eq. 20}$$

$$\rho_{i,b} = C_g y_{i,b} M_i = C_{i,b} M_i \quad \text{Eq. 21}$$

La vitesse superficielle moyenne du gaz ainsi que les vitesses superficielles du gaz dans les deux phases s'écrivent :

$$u_g = \frac{F_g}{C_g S} \quad \text{Eq. 22}$$

$$u_b = \frac{F_b}{C_b S_b} \quad \text{Eq. 23}$$

$$u_e = \frac{F_e}{C_e S_e} \quad \text{Eq. 24}$$

Les équations précédentes démontrent qu'à mesure que le volume occupé par les bulles augmente, plus la surface occupée par les bulles (S_b) augmente à une hauteur donnée et donc plus la vitesse superficielle dans la phase bulles diminue. En contrepartie, la vitesse superficielle dans la phase émulsion augmente. Puisque le diamètre des bulles augmente à mesure que celles-ci montent dans le lit, la surface occupée par les bulles augmente tandis que celle occupée par la phase émulsion diminue. Les relations suivantes définissent le changement de surface selon z pour les deux phases :

$$S_E = \frac{S}{f_{bexp}} \quad \text{Eq. 25}$$

$$S_B = S - S_E \quad \text{Eq. 26}$$

Où f_{bext} est le facteur d'expansion du lit.

4.5 Expansion du lit

Le facteur d'expansion du lit renseigne sur le ratio entre le volume du lit à une vitesse du fluide donnée et le volume du lit à la vitesse de fluidisation minimale. Puisque la section du lit reste constante, alors il est possible d'écrire la relation empirique [68, 69] :

$$f_{bexp} = \frac{H(u)}{H(u_{mf})} = 1 + \frac{1.032(u - u_{mf})^{0.57} \rho_G^{0.083}}{\rho_P^{0.166} u_{mf}^{0.063} d_D^{0.445}} \quad d_D < 0.0635 \quad \text{Eq. 27}$$

$$f_{bexp} = \frac{H(u)}{H(u_{mf})} = 1 + \frac{14.314(u - u_{mf})^{0.738} d_P^{1.006} \rho_P^{0.376}}{\rho_G^{0.126} u_{mf}^{0.937}} \quad d_D \geq 0.0635 \quad \text{Eq. 28}$$

4.6 Bulles

Le diamètre d'une bulle en fonction de z est donné par la formule suivante [70] :

$$d_b(z) = d_{b,max} - (d_{b,max} - d_{b,min}) e^{-0.3z/d_D} \quad \text{Eq. 29}$$

Où $d_{b,min}$ est le plus petit diamètre d'une bulle et correspond au diamètre de l'orifice au niveau du distributeur et $d_{b,max}$ correspond au diamètre maximale de la bulle après quoi la bulle éclate. Ces diamètres sont donnés par :

$$d_{b,max} = 2.59 g^{-0.3} [S(u - u_{mf})]^{0.4} \quad \text{Eq. 30}$$

$$d_{b,min} = 1.38 g^{-0.2} \left[\frac{S(u - u_{mf})}{n_{orifices}} \right]^{0.4} \quad \text{Eq. 31}$$

Il est alors possible de connaître la vitesse de la bulle au fur et à mesure de sa montée en tout point sur l'axe [35] :

$$u_b = u_g - u_{mf} + 0.711 \sqrt{g d_b} \quad \text{Eq. 32}$$

4.7 Porosité

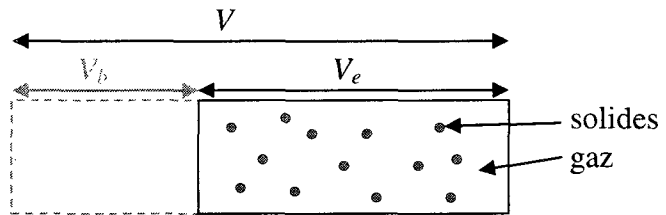
La porosité dans le lit est donnée par le rapport entre le volume de gaz dans le lit et le volume total du lit [69]:

$$\varepsilon = \frac{V_g}{V} \quad \text{Eq. 33}$$

Le volume total du lit s'écrit :

$$V = V_b + V_e \quad \text{Eq. 34}$$

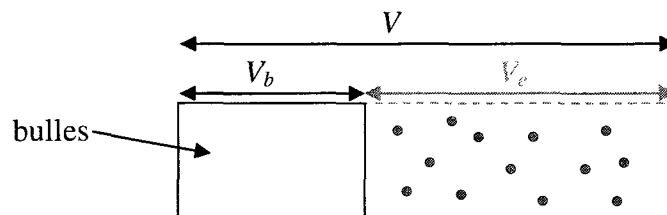
La porosité de la phase émulsion ou la fraction volumique de gaz contenue dans la phase émulsion est donnée par le rapport du gaz sur le volume de la phase émulsion :



$$\varepsilon_e = \frac{V_{g,e}}{V_e} \quad \text{Eq. 35}$$

La fraction volumique de solides dans la phase émulsion s'écrit donc $1 - \varepsilon_e$.

La fraction volumique des bulles dans le lit est le rapport du volume total occupé par les bulles par rapport au volume du lit :



$$\varepsilon_b = \frac{V_b}{V} \quad \text{Eq. 36}$$

Le volume total de gaz dans le lit s'écrit :

$$V_g = V_b + V_{g,e} \quad \text{Eq. 37}$$

Or, on peut écrire :

$$\varepsilon = \frac{V_b}{V} + \frac{V_{g,e}}{V} = \varepsilon_b + \frac{V_{g,e}}{V_e} \frac{V_e}{V} = \varepsilon_b + \varepsilon_e \frac{V_e}{V} = \varepsilon_b + \varepsilon_e \frac{V - V_b}{V} = \varepsilon_b + \varepsilon_e (1 - \varepsilon_b)$$

De sorte qu'il est alors possible de réécrire la relation de la porosité dans la phase bulle en fonction de la porosité dans le lit et dans la phase émulsion:

$$\boxed{\varepsilon_b = 1 - \frac{1 - \varepsilon}{1 - \varepsilon_e}} \quad \text{Eq. 38}$$

En l'absence d'une relation universelle entre la porosité et la sphéricité ϕ_A , la porosité à la vitesse minimale de fluidisation est donnée par la corrélation empirique :

$$\varepsilon_{mf} = \left(\frac{1}{14\phi_A} \right)^{1/3} \quad \text{Eq. 39}$$

Cette relation reste valide dans les conditions d'opération typiques d'un lit fluidisé [71]. La détermination de la sphéricité est déterminée en laboratoire mais en l'absence de données expérimentales, la valeur de 0.7 peut être utilisée pour les mélanges en régime permanent.

Puisque le volume de la phase émulsion change, alors la porosité de cette phase selon l'axe du réacteur change. L'hypothèse du modèle implique qu'à la base du lit, la

porosité de la phase émulsion est égale à la porosité à la vitesse de fluidisation minimale :

$$\varepsilon_{E,z=0} = \varepsilon_{mf,z=0} \quad \text{Eq. 40}$$

La porosité de la phase émulsion selon l'axe du réacteur est décrite par la corrélation :

$$\varepsilon_e = \varepsilon_{mf} \left(\frac{u_e}{u_{mf}} \right)^{1/6.7} \quad \text{Eq. 41}$$

Les relations précédentes et la définition du facteur d'expansion du lit permettent alors d'écrire :

$$\varepsilon = \frac{V_g}{V} = 1 - \frac{1 - \varepsilon_e}{f_{\text{exp}}} \quad \text{Eq. 42}$$

4.8 Coefficient d'échange de matière entre les deux phases

Le gaz circule entre la phase émulsion et la phase bulle. Le flux de gaz est proportionnel à la concentration dans chacune des deux phases et est relié par un facteur de proportionnalité [72] :

$$K_{BE} = \frac{2u_{mf}}{d_b} + 6.77 \sqrt{\frac{D_g \varepsilon_{mf} u_b}{d_b^3}} \quad \text{Eq. 43}$$

4.9 Zone d'emportement

Les bulles qui éclatent à la surface du lit emportent avec elles des particules et celles-ci sont éjectées vers le haut en raison du transfert de quantité de mouvement et les forces de traînée. Une zone, appelée *zone d'emportement* (figure 2a) permet aux particules d'être éjectées. Les particules ou groupes de particules subissant une force de traînée inférieure à la force de gravité retournent dans le lit. Le flux de particules diminue donc exponentiellement le long de l'axe du réacteur. À une certaine distance du dessus du lit appelée hauteur de désengagement, une fraction négligeable de particules retourne au lit et le taux de particules qui continuent au-delà de cette distance est appelé le *taux d'élutriation*. Les particules ayant une vitesse terminale (voir annexe 2 pour le calcul de la vitesse terminale) inférieure à la vitesse superficielle retournent au lit. Les autres particules sont entraînées avec le gaz et sont généralement séparées dans un cyclone.

4.10 Bilans molaires

4.10.1 Lit fluidisé

Dans un réacteur de type PFR, on considère un élément infinitésimal dz , dans lequel on effectue un bilan de matière. Cet élément se divise en une phase émulsion et une phase bulles. La figure 4.4 illustre l'élément infinitésimal ainsi que la surface de l'interface occupée par les deux phases à une hauteur z donnée. Cette surface correspond à la surface totale des bulles à une position z donnée.

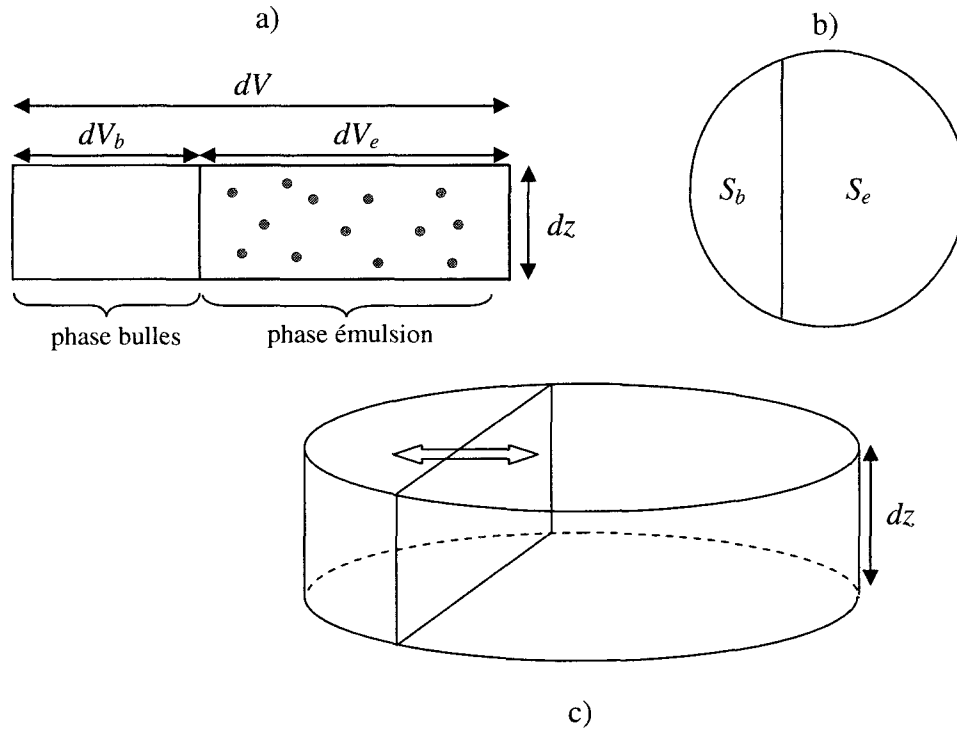


Figure 4.4: Élément infinitésimal dz et surfaces occupées par les deux phases.

Le traitement mathématique des gaz dans les deux phases est similaire ; un terme de réactions gaz-solide est cependant présent dans la phase émulsion étant donné la présence de particules dans cette phase (hypothèse 3). La formulation du problème débute par l'approche du réacteur PFR en régime permanent. Pour la phase bulles, dans un élément infinitésimal de volume dV_b dans lequel seules des réactions j en phase gazeuses (g-g) entre les éléments i ont lieu (hypothèse 2), il est possible d'écrire :

$$\frac{dF_{gb}}{dV_{gb}} = R_{\text{hom}} = \sum_{g-g} v_{ij} R_j \quad \text{Eq. 44}$$

Pour la phase émulsion, la relation s'écrit :

$$\frac{dF_{ge}}{dV_{ge}} = R_{\text{hom}} + R_{\text{het}} = \sum_{g-g} v_{ij} R_j + \sum_{g-s} v_{ij} R_j \quad \text{Eq. 45}$$

Les éléments infinitésimaux de gaz dans les deux phases peuvent s'écrire, en utilisant les relations 36 et 38 :

$$dV_{gb} = dV_b = d(\varepsilon_b V) = \varepsilon_b dV = \varepsilon_b S dz \quad \text{Eq. 46}$$

$$dV_{ge} = d[\varepsilon_e V_e] = d[\varepsilon_e (1 - V_b)] = d[\varepsilon_e (1 - \varepsilon_b) V] = \varepsilon_e (1 - \varepsilon_b) dV = \varepsilon_e (1 - \varepsilon_b) S dz \quad \text{Eq. 47}$$

Ainsi, les équations 46 et 47 s'écrivent :

$$\frac{1}{\varepsilon_b} \frac{dF_{gb}}{dV} = R_{\text{hom}} \quad \text{Eq. 48}$$

$$\frac{1}{\varepsilon_e (1 - \varepsilon_b)} \frac{dF_{ge}}{dV} = R_{\text{hom}} + R_{\text{het}} \quad \text{Eq. 49}$$

De la première loi de Fick, la différence de concentration entre les deux phases implique qu'un flux massique J (ou terme d'échange) entre les deux régions a lieu au niveau de l'interface entre les deux phases. Par convention, le flux de matière est entrant dans la phase bulle et sortant dans la phase émulsion. La conservation de la masse implique que le terme est égal dans les deux phases. En absence de réaction, ce terme d'échange s'écrit :

$$\left. \frac{dF_{gb}}{dV} \right|_{\text{bulles} \rightarrow \text{émulsion}} = - \left. \frac{dF_{gb}}{dV} \right|_{\text{émulsion} \rightarrow \text{bulles}} = \varepsilon_b J \frac{S_b}{V_b} \quad \text{Eq. 50}$$

Ainsi, ce terme s'ajoute aux équations 48 et 49 :

$$\frac{dF_{gb}}{dV} = \varepsilon_b R_{\text{hom}} + \varepsilon_b J \frac{S_b}{V_b} \quad \text{Eq. 51}$$

$$\frac{dF_{ge}}{dV} = \varepsilon_e (1 - \varepsilon_b) (R_{\text{hom}} + R_{\text{het}}) - \varepsilon_b J \frac{S_b}{V_b} \quad \text{Eq. 52}$$

Où le flux de matière J entre les deux phases est défini selon la loi de Fick en 1D:

$$J = -D \nabla \Phi = -D (C_b - C_e) \frac{V_b}{S_b} = D C_g (y_e - y_b) \frac{V_b}{S_b} \quad \text{Eq. 53}$$

Pour fins de cohérence avec la notation généralement employée dans la littérature, le terme de diffusion D est remplacé par le terme d'échange entre les deux phases K_{BE} . Ainsi, les équations à résoudre s'écrivent :

$$\frac{dF_{gb}}{dV} = \varepsilon_b R_{\text{hom}} + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_e - y_b) \quad \text{Eq. 54}$$

$$\frac{dF_{ge}}{dV} = \varepsilon_e (1 - \varepsilon_b) (R_{\text{hom}} + R_{\text{het}}) + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_b - y_e) \quad \text{Eq. 55}$$

En utilisant les relations 23 et 24, le différentiel du débit molaire s'écrit :

$$dF_{gb} = d(u_b C_b S_b) \quad \text{Eq. 56}$$

$$dF_{ge} = d(u_e C_e S_e) \quad \text{Eq. 57}$$

En substituant les termes dans les équations différentielles 51 et 52 :

$$\frac{dF_{gb}}{dV_b} = \frac{d(u_b C_b S_b)}{S_b dz} = \frac{d(u_b C_b)}{dz} \quad \text{Eq. 58}$$

$$\frac{dF_{ge}}{dV_{g,e}} = \frac{d(u_e C_e S_e)}{(1-\varepsilon_b) S dz} = \frac{d\left[u_e C_e \frac{S-S_b}{S}\right]}{(1-\varepsilon_b) dz} = \frac{d[u_e C_e (1-\varepsilon_b)]}{(1-\varepsilon_b) dz} = \frac{d(u_e C_e)}{dz} \quad \text{Eq. 59}$$

Les équations 58 et 59 peuvent alors s'écrire de façon équivalente aux équations 54 et 55:

$$\frac{dF_{gb}}{dV} = \varepsilon_b \frac{d(u_b C_b)}{dz} = \varepsilon_b R_{\text{hom}} + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_e - y_b)_{\text{hom}} \quad \text{Eq. 60}$$

$$\frac{dF_{ge}}{dV} = \varepsilon_e (1-\varepsilon_b) \frac{d(u_e C_e)}{dz} = \varepsilon_e (1-\varepsilon_b) (R_{\text{hom}} + R_{\text{het}}) + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_b - y_e) \quad \text{Eq. 61}$$

Les équations 54 et 55 peuvent être exprimées pour chacun des constituants :

$$\frac{dF_{i,gb}}{dV} = \varepsilon_b \frac{d(u_b y_{i,b} C_g)}{dz} = \varepsilon_b \sum_{g \rightarrow g} v_{ij} R_j + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_{i,e} - y_{i,b}) \quad \text{Eq. 62}$$

$$\frac{dF_{i,ge}}{dV} = \varepsilon_e (1-\varepsilon_b) \frac{d(u_e y_{i,e} C_g)}{dz} = \varepsilon_e (1-\varepsilon_b) \left(\sum_{g \rightarrow g} v_{ij} R_j + \sum_{g \rightarrow s} v_{ij} R_j \right) + \varepsilon_b K_{BE} C_g (y_{i,b} - y_{i,e}) \quad \text{Eq. 63}$$

Un exemple de calcul est fourni en annexe 2.

4.10.2 Conditions aux frontières

La théorie du modèle à deux phases implique que, à la base du lit, la vitesse de la phase émulsion correspond à la vitesse minimale de fluidisation :

$$u_{e,z=0} = u_{mf,z=0} \quad \text{Eq. 64}$$

Il est alors possible, en utilisant l'équation 24, de trouver le débit molaire du gaz dans la phase émulsion :

$$F_{ge,z=0} = u_{mf,z=0} \rho_e S_E \quad \text{Eq. 65}$$

La composition du gaz au niveau du distributeur ($z = 0$) du gazogène est connue et est la même pour les deux phases :

$$w_{ge,i,z=0} = w_{gb,i,z=0} = w_{g,i,z=0} \quad \text{Eq. 66}$$

Il est alors possible de déterminer les débits massique pour la phase émulsion et la phase bulle, en utilisant l'équation 11 :

$$F_{i,e,z=0} = F_{e,z=0} w_{g,i,z=0} \quad \text{Eq. 67}$$

$$F_{i,b,z=0} = (F_{g,z=0} - F_{e,z=0}) w_{g,i,z=0} \quad \text{Eq. 68}$$

4.11 Zone d'entraînement

Dans la zone d'entraînement, la fraction volumique de particules n'est pas prise en compte dans le calcul. Ainsi, seules les réactions gazeuses ont lieu, de sorte que l'équation du bilan molaire s'écrit :

$$\frac{dF_{i,fb}}{dV} = \sum_{g-g} v_{ij} R_j \quad \text{Eq. 69}$$

4.11.1 Conditions aux frontières

La condition à la frontière pour cette équation est donnée par le débit molaire des gaz sortants au dessus du lit :

$$F_{i,fb,z'=0} = \sum_{g-g} (F_{i,gb,z=h} + F_{i,ge,z=h}) \quad \text{Eq. 70}$$

Où z' représente la hauteur dans la zone de désengagement ($z'=0$ représente l'interface entre le lit et la zone de désengagement).

4.12 *Modèle du mélange des particules*

Dans le réacteur, les particules subissent un mouvement ascendant ou descendant. En effet, celles-ci sont poussées vers le haut dû à la force de trainée engendrée par le flux du gaz de fluidisation. Le mouvement descendant est quant à lui engendré, entre autres, par la conversion des particules qui entraîne une diminution de leur taille; celles-ci ont alors une vitesse terminale inférieure à la vitesse $U(z)$ et retournent dans le lit. De plus, la vitesse nulle près des parois du réacteur entraîne un profil de vitesse radial; la plus faible vitesse près des parois du réacteur permet aux particules dont la vitesse terminale est inférieure à la vitesse minimale de fluidisation de redescendre.

L'étude suivante reprend en détail le modèle CCBM pour un mélange de particules subissant des réactions chimiques et tente de valider l'approche de Radmanesh [51] Ce modèle à deux phases prend en compte la présence d'un flux de particule ascendant (1) et descendant (2) ainsi que d'un échange entre ces deux phases par l'entremise d'un coefficient de transfert K_w dû à une différence de concentration des particules. La

résolution du problème dans Matlab est expliquée en annexe 3. Le modèle débute par l'étude de la conservation de la masse.

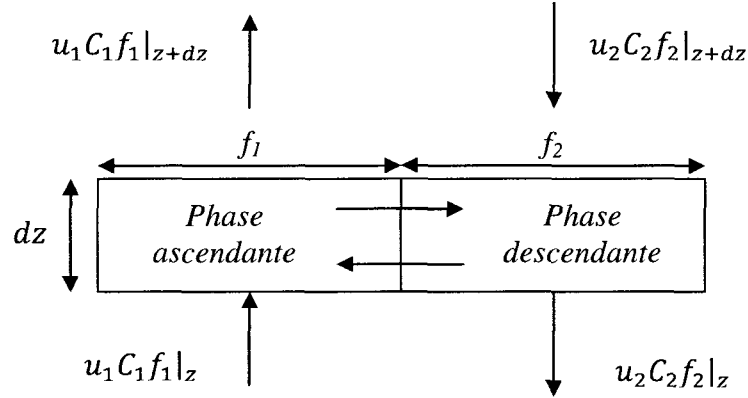


Figure 4.5: Modèle CCBM. Élément infinitésimal dz . Un gradient de concentration entre la phase ascendante et descendante entraîne un échange de matière entre les deux phases.

La concentration de solides est une fonction du temps et de z . Les fractions volumiques f_1 et f_2 de particules dans la phase ascendante et descendante sont respectivement définies comme suit :

$$f_1 = \frac{u_1}{u_1 + u_2} \quad \text{Eq. 71}$$

$$f_2 = 1 - f_1 \quad \text{Eq. 72}$$

Où u_1 et u_2 sont les *valeurs algébriques* des vitesses ascendantes et descendantes. La convention adoptée est qu'une entrée de matière est positive et qu'une sortie est négative. En l'absence de réactions chimiques, le bilan de matière sur une tranche dz s'écrit :

$$-\frac{\partial C_1 f_1}{\partial t} = \frac{\partial u_1 C_1 f_1}{\partial z} + K_w(C_1 - C_2)f_1 \quad \text{Eq. 73}$$

$$-\frac{\partial C_2 f_2}{\partial t} = -\frac{\partial u_2 C_2 f_2}{\partial z} + K_w(C_2 - C_1)f_1 \quad \text{Eq. 74}$$

La forme des équations précédentes est celle de l'équation d'advection et peut-être résolue spatialement par un schéma de résolution upwind d'ordre 2 et temporellement à l'aide d'une méthode d'Euler d'ordre 2. Ce premier schéma de calcul est spécifique pour les classes de problèmes dans lesquelles l'information se propage. La méthodologie employée pour résoudre un tel problème est expliquée en annexe 3.

L'absence de flux de matière aux limites du lit implique que les conditions aux frontières sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1(z=0,t)}{\partial z} &= \frac{\partial C_1(z=H,t)}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial C_2(z=0,t)}{\partial z} &= \frac{\partial C_2(z=H,t)}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 75}$$

Il est important de noter que l'absence de flux aux extrémités implique alors qu'en $z=0$ et en $z=H$, la matière est échangée d'une phase à l'autre.

En prenant en compte le fait que la concentration varie due à la présence des réactions hétérogènes, le terme de taux de réaction gaz-solide s'ajoute aux équations d'advection précédentes.

$$-\frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{\partial u_1 C_1}{\partial z} + K_w(C_1 - C_2) - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_1 \quad \text{Eq. 76}$$

$$-\frac{\partial C_2}{\partial t} = -\frac{\partial u_2 C_2}{\partial z} + K_w(C_2 - C_1) \frac{f_1}{f_2} - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_2 \quad \text{Eq. 77}$$

En régime permanent, le système d'équation s'écrit :

$$-\frac{\partial u_1 C_1}{\partial z} = K_w(C_1 - C_2) - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_1 \quad \text{Eq. 78}$$

$$\frac{\partial u_2 C_2}{\partial z} = K_w(C_2 - C_1) \frac{f_1}{f_2} - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_2 \quad \text{Eq. 79}$$

La concentration massique dans les deux phases est reliée à la conversion par les relations suivantes :

$$C_1 = C_{1,0}(1 - X_1) = \frac{F_{1,0}}{u_1 f_1 S} (1 - X_1) \quad \text{Eq. 80}$$

$$C_2 = C_{2,0}(1 - X_2) = \frac{F_{2,0}}{u_2 f_2 S} (1 - X_2) \quad \text{Eq. 81}$$

Ces deux dernières équations, substituées dans les équations 78 et 79, permettent d'écrire :

$$\frac{F_{1,0}}{f_1 S} \frac{\partial X_1}{\partial z} = \frac{F_{1,0}}{f_1} \frac{\partial X_1}{\partial V} = K_w(C_1 - C_2) - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_1 \quad \text{Eq. 82}$$

$$\frac{-F_{2,0}}{f_2 S} \frac{\partial X_2}{\partial z} = \frac{-F_{2,0}}{f_2} \frac{\partial X_2}{\partial V} = K_w(C_2 - C_1) \frac{f_1}{f_2} - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_2 \quad \text{Eq. 83}$$

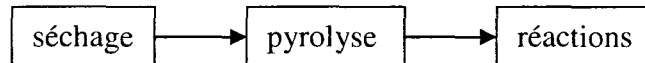
Le système à résoudre s'écrit donc :

$$\frac{\partial X_1}{\partial V} = \frac{f_1}{F_{1,0}} \left[K_w(C_1 - C_2) - \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_1 \right] \quad \text{Eq. 84}$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial V} = \frac{f_2}{F_{2,0}} \left[K_w(C_1 - C_2) \frac{f_1}{f_2} + \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_2 \right] \quad \text{Eq. 85}$$

4.13 Modèle cinétique

La biomasse entrante dans le gazogène subit trois réactions importantes dans le gazogène :



4.13.1 Séchage

La biomasse entrante dans le gazogène contient un certain taux d'humidité. Lorsque la biomasse se trouve dans le système d'alimentation du réacteur, celle-ci subit des températures élevées à mesure qu'elle se rapproche du lit. Ainsi, il y a évaporation d'une partie de l'eau contenue dans la biomasse et celle-ci doit être prise en compte par la modèle. La quantité d'eau contenue dans la biomasse est mesurée à l'aide de la thermogravimétrie analytique et elle peut être utilisée pour déterminer la concentration volumique de vapeur d'eau présente lorsque la biomasse est insérée dans le réacteur.

4.13.2 Réactions de pyrolyse

Les réactions de pyrolyse ont lieu à des vitesses beaucoup plus grandes que le temps que prennent les particules pour se mélanger dans le lit [73]. Ainsi les réactions de pyrolyse ont lieu avant même que les particules n'aient eu le temps de se mélanger au

lit. La concentration volumique des composés volatiles issus de la pyrolyse constituent les conditions initiales aux réactions subséquentes de gazéification $z = 0$. L'utilisation d'un modèle cinétique des réactions de pyrolyse ne s'avère donc pas nécessaire dans le modèle de gazéification. Des expériences de thermogravimétrie analytique et de chromatographie en phase gazeuse sont donc nécessaires pour déterminer la concentration initiale des gaz de pyrolyse dans la zone où est insérée la biomasse.

4.13.3 Réactions de gazéification

Dans le processus de gazéification, des réactions homogènes et hétérogènes ont lieu et doivent être traitées séparément. Trois réactions sont prédominantes dans le processus de gazéification :

- Réaction Boudouard : $C + CO_2 \rightarrow 2CO$
- Réaction Eau-Gaz (water-gas) : $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$
- Réaction de conversion Eau-gaz (water-gas shift) : $CO + H_2O \rightarrow H_2 + CO_2$

4.13.3.1 Réactions hétérogènes

Les réactions hétérogènes sont celles pour lesquelles les gaz réagissent avec les particules solides de char. Ces particules sont la matière restante après le séchage et la volatilisation des gaz. Elles sont essentiellement constituées de carbone qui réagit alors avec l'oxygène, l'eau et le dioxyde de carbone. Ces particules proviennent des réactions de pyrolyse. Les cinétiques de réactions pour différentes conditions et biomasses peuvent être trouvées dans Janse (1998) [44].

Tableau 4.1: Liste des réactions chimiques entre le gaz et les particules de char (réactions g-s).

No.	Réaction chimique	Taux de conversion [s ⁻¹]	Δh_r [kJ/mol]	Intervalles	Réf.
R1	$2 \frac{\eta+1}{\eta+2} C + O_2 \xrightarrow{k_1} \frac{2\eta}{\eta+2} CO + \frac{2}{\eta+2} CO_2$ $\eta = 2500 \exp\left(\frac{-6240}{T_{mur}}\right)$	$\frac{dX}{dt} = 5.3 \times 10^5 \exp\left(\frac{-125000}{RT_{mur}}\right) p_{O_2}^{0.55} (1-X_r)^{0.49}$	-111	573 < T [K] * < 773 2.25% < P _{O2} /P _{N2} < 36%	[74]
R2	$C + H_2O \xrightarrow{k_2} CO + H_2$	$\frac{dX}{dt} = 1.23 \times 10^7 \exp\left(\frac{-198000}{RT_{mur}}\right) p_{H_2O}^{0.75} (1-X)^{0.75}$	131	923 < T [K] < 1273	[75]
R3	$C + CO_2 \xrightarrow{k_3} 2CO$	$\frac{dX}{dt} = \frac{9.10 \times 10^6}{T^{0.8}} \exp\left(\frac{-166000}{RT}\right) p_{CO_2}^{0.8} [(1-X)^{1/3}]$	172	21 < P _{H2O} [kPa] < 100	[76].

* Par hypothèse, l'équation reste valide à des valeurs supérieures à cet intervalle.

Il est possible de déterminer le taux de réaction des particules de char de la manière suivante. Par exemple, pour l'oxydation du carbone, le calcul suivant est employé :

$$\begin{aligned}
 \frac{r_{1,C}}{-\left(2 \frac{\eta+1}{\eta+2}\right)} &= -[C] \frac{dX}{dt} = -\left[\frac{\omega_c \rho_p}{M_c}\right] \frac{dX}{dt} = \frac{r_{1,O_2}}{-1} = \frac{r_{1,CO_2}}{\left(\frac{2}{\eta+2}\right)} = \frac{r_{1,CO}}{\left(\frac{2\eta}{\eta+2}\right)} \\
 \frac{r_{2,C}}{-1} &= -[C] \frac{dX}{dt} = -\left[\frac{\omega_c \rho_p}{M_c}\right] \frac{dX}{dt} = \frac{r_{2,H_2O}}{-1} = \frac{r_{2,CO}}{1} = \frac{r_{H_2}}{1} \\
 \frac{r_{3,C}}{-1} &= -[C] \frac{dX}{dt} = -\left[\frac{\omega_c \rho_p}{M_c}\right] \frac{dX}{dt} = \frac{r_{3,CO_2}}{-1} = \frac{r_{3,CO}}{2}
 \end{aligned}$$

4.13.3.2 Réactions homogènes

Tableau 4.2 : Liste des réactions homogènes utilisées dans le modèle

No.	Réaction chimique	Taux de réaction [mol·m ⁻³ ·s ⁻¹]	Réf.
R4 (Shift reaction)	$CO + H_2O \xrightleftharpoons{k_4} H_2 + CO_2$	$r_4 = -2.78 \cdot 10^3 \cdot e^{-\frac{1510}{T}} \cdot \left([CO][H_2O] - [CO_2] \cdot \frac{[H_2]}{K} \right)$	[17]
R5 (Combustion monoxyde de carbone)	$CO + 1/2O_2 \xrightleftharpoons{k_5} CO_2$	$r_5 = \frac{-3.552 \cdot 10^{11}}{T} \cdot e^{-\frac{15700}{T}} \cdot [CH_4][O_2]$	[17]
R6 (Combustion hydrogène)	$H_2 + 1/2O_2 \xrightleftharpoons{k_6} H_2O$	$r_6 = -51.8 \cdot T^{1.5} \cdot e^{-\frac{3420}{T}} \cdot [H_2]^{11.5} \cdot [O_2]$	[77]
R7 (Combustion méthane)	$CH_4 + 2O_2 \xrightleftharpoons{k_7} CO_2 + 2H_2O$	$r_7 = -3.552 \cdot 10^{11} \cdot \frac{e^{-\frac{15700}{T}}}{T} \cdot [CH_4] \cdot [O_2]$	[17]
R8 (combustion méthane)	$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \xrightleftharpoons{k_8} CO + 2H_2O$	$r_7 = -1.6 \cdot 10^{11} \cdot e^{-\frac{24157}{T}} \cdot [CH_4]^{10.7} \cdot [O_2]^{10.8}$	[17]
R9 (tar combustion)	$CH_{1.522}O_{0.0228} + 0.867O_2 \xrightarrow{k_9} CO + 0.76H_2O$	$r_9 = \frac{9.2 \cdot 10^6}{M_{Tar}} T_e^{-9650/T_e} [Tar]^{0.5} [O_2]$ $M_{Tar} = 31.2 \text{ g/mol}$ $T_e = \alpha T_g + (1-\alpha)T_s \text{ si } T_g \leq T_s$ $T_e = T_g \text{ si } T_g \geq T_s$	[78]
R10 (Tar cracking)	$tar \xrightarrow{k_{10}} \nu_{H_2} H_2 + \nu_{CH_4} CH_4 + \nu_{CO} CO + \nu_{CO_2} CO_2 + \nu_{tar} tar$	$r_{10} = -10^{4.98} \cdot e^{-\frac{93}{RT}} \cdot [Tar]^{0.7}$	[79]
R11	$CH_4 + H_2O \xrightleftharpoons{k_{11}} 3H_2 + CO$	$r_{11} = -3.3 \cdot 10^{10} \cdot e^{-\frac{240000}{RT}} \cdot [CH_4]^{1.7} \cdot [H_2]^{10.8}$	[80]
R12	$C_2H_4 + 2O_2 \xrightleftharpoons{k_{12}} 2CO + 2H_2O$	$r_{12} = -2.7 \cdot 10^8 \cdot T^{0.5} \cdot e^{-\frac{20131}{T}} \cdot [C_2H_4] \cdot [O_2]$	[77]
R13	$C_2H_6 + 2O_2 \xrightleftharpoons{k_{13}} 2CO + 3H_2O$	$r_{13} = -2.7 \cdot 10^8 \cdot T^{0.5} \cdot e^{-\frac{20131}{T}} \cdot [C_2H_6] \cdot [O_2]$	[77]

4.14 Pouvoir calorifique du combustible

Le pouvoir calorifique supérieur du combustible peut être évalué par la connaissance de la composition élémentaire et des résultats de la thermogravimétrie analytique. La relation empirique suivante est utilisée [56, 58] :

$$PCS \text{ [kJ/kg]} = 0.3491 [C_C] + 1.1783 [C_H] + 0.1005 [C_S] + 0.1034 [C_O] + 0.0151 [C_N] + 0.0211 [C_{ash}] \quad \text{Eq. 86}$$

4.15 Pouvoir calorifique du gaz de synthèse

Le pouvoir calorifique supérieur du gaz de synthèse peut être évalué par la connaissance de la concentration de ses constituants (obtenu par chromatographie gazeuse). La relation empirique suivante est utilisée:

$$PCS = 0.1275 [CO] + 0.1263 [CH_4] + 0.3982 [H_2] \quad [\text{MJ/Nm}^3] \quad \text{Eq. 87}$$

Où $[CO]$, $[CH_4]$ et $[H_2]$ sont les concentrations volumiques de CO, CH₄ et H₂ aux conditions standards.

4.16 Rapport d'équivalence

Le rapport d'équivalence ϕ est défini comme étant le ratio air/combustible par rapport au ratio air/combustible pour la combustion complète du combustible. La variation de ce rapport donne lieu à des procédés pouvant être classifiés en trois classes : pyrolyse ($\phi = 0$), gazéification ($0.2 < \phi < 0.5$) et combustion ($\phi > 1$). La qualité du gaz de synthèse est fortement dépendante du rapport entre l'apport en air et en biomasse. Ces deux derniers paramètres de contrôle peuvent être indépendamment contrôlés dans le réacteur. Un apport trop faible en air engendre des problèmes de réactions incomplètes de gazéification, une trop grande quantité de char et une trop faible valeur calorifique du

gaz. À l'opposé, un apport trop grand en oxygène engendre une plus grande formation de produits de combustion tel que le CO_2 et H_2O aux dépends des gaz d'intérêts tels que H_2 et CO . Le rapport d'équivalence est donné par :

$$\phi = \frac{CA}{CA_{st}} = \frac{\frac{\dot{m}_{comb}}{\dot{m}_{ox}}}{\left(\frac{\dot{m}_{comb}}{\dot{m}_{ox}}\right)_{st}} = \frac{\frac{F_{comb}}{F_{ox}}}{\left(\frac{F_{comb}}{F_{ox}}\right)_{st}} = \frac{\frac{\dot{m}_{ox}}{\dot{m}_{comb}}}{SR} \quad \text{Eq. 88}$$

Où : CA = rapport combustible-air

CA_{st} = rapport air-combustible pour combustion complète (stœchiométrique)

SR = rapport stœchiométrique

L'avantage d'utiliser ce rapport est qu'il demeure le même selon que la masse ou le nombre de mole est utilisé. De même, des débits massiques ou molaires peuvent être utilisés.

La difficulté du problème réside à trouver le rapport stœchiométrique SR . Il existe différentes méthodes pour calculer ce coefficient et celles-ci sont détaillées dans Zhu (2005) [56]. L'équation suivante permet de connaître le SR en sachant la composition élémentaire du combustible :

$$SR = \left(\frac{C_C}{12} + \frac{C_H}{4} - \frac{C_O}{32} \right) \left(1 + \frac{79}{21} \right) \left(1 - \frac{C_{ash}}{100} \right) \frac{28.84}{100} \quad \text{Eq. 89}$$

Il a été démontré que la structure chimique peut être négligée dans l'évaluation du rapport stœchiométrique. Ce rapport varie linéairement en fonction du pouvoir calorifique supérieur de la biomasse. Ainsi, l'équation suivante peut être utilisée, de manière équivalente, pour déterminer SR , avec une erreur relative de 5% :

$$SR_{st} = 0.31 PCS \quad \text{Eq. 90}$$

4.17 Résumé du modèle

Le tableau 4.3 contient le résumé des équations utilisées dans le modèle.

Tableau 4.3 : Résumé du système d'équation

Équation	Nom
$\frac{u_{mf} d_p \rho_g}{\mu} = [a_1^2 + a_2^2 N_{ar}]^2 - a_1$	Vitesse minimale de fluidisation
$u_{mb} = 2.07 e^{0.716F} \langle d_p \rangle \left[\frac{\rho_g^{0.06}}{\langle \mu \rangle^{0.347}} \right]$	Vitesse minimale des bulles
$S_E = \frac{S}{f_{b \exp}}$	Surface de la phase émulsion
$S_B = S - S_E$	Surface de la phase bulles
$f_{b \exp} = \frac{H(u)}{H(u_{mf})} = 1 + \frac{1.032(u - u_{mf})^{0.57} \rho_G^{0.083}}{\rho_p^{0.166} u_{mf}^{0.063} d_D^{0.445}} \quad d_D < 0.0635$	Facteur d'expansion du lit
$f_{b \exp} = \frac{H(u)}{H(u_{mf})} = 1 + \frac{14.314(u - u_{mf})^{0.738} d_p^{1.006} \rho_p^{0.376}}{\rho_G^{0.126} u_{mf}^{0.937}} \quad d_D \geq 0.0635$	
$d_b(z) = d_{b, \max} - (d_{b, \max} - d_{b, \min}) e^{-0.3z/d_D}$	Diamètre de bulle
$d_{b, \max} = 2.59 g^{-0.3} [S(u - u_{mf})]^{0.4}$	Diamètre maximal de bulle
$d_{b, \min} = 1.38 g^{-0.2} \left[\frac{S(u - u_{mf})}{n_{orifices}} \right]^{0.4}$	Diamètre minimal de bulle
$u_b = u_g - u_{mf} + 0.71 \sqrt{g d_b}$	Vitesse de bulle
$\epsilon_b = 1 - \frac{1 - \epsilon}{1 - \epsilon_e}$	Porosité de la phase bulle
$\epsilon_{mf} = \left(\frac{1}{14 \phi_A} \right)^{1/3}$	Porosité aux conditions minimales de fluidisation
$\epsilon_e = \epsilon_{mf} \left(\frac{u_e}{u_{mf}} \right)^{1/6.7}$	Porosité de la phase émulsion
$K_{BE} = \frac{2u_{mf}}{d_b} + 6.77 \sqrt{\frac{D_g \epsilon_{mf} u_b}{d_b^3}}$	Coefficient d'échange de matière entre les phases
$\frac{dF_{i,gb}}{dV} = \epsilon_b \sum_{g \rightarrow g} v_{ij} R_j + \epsilon_b K_{BE} C_g (y_{i,e} - y_{i,b})$	Équation différentielle du débit molaire dans la phase bulles
$\frac{dF_{i,ge}}{dV} = \epsilon_e (1 - \epsilon_b) \left(\sum_{g \rightarrow g} v_{ij} R_j + \sum_{g \rightarrow s} v_{ij} R_j \right) + \epsilon_b K_{BE} C_g (y_{i,b} - y_{i,e})$	Bilan de matière dans la phase bulles
$\frac{\partial X_1}{\partial V} = \frac{f_1}{F_{1,0}} \left[K_w (C_1 - C_2) - \left(\sum_{g \rightarrow s} v_{i,C} R_i \right)_1 \right]$	Bilan de carbone dans la phase ascendante

$$\frac{\partial X_2}{\partial V} = \frac{f_2}{F_{2,0}} \left[K_w (C_1 - C_2) \frac{f_1}{f_2} + \left(\sum_{g-s} v_{i,C} R_i \right)_2 \right]$$

Bilan de carbone dans la phase descendante

Le tableau 4.4 résume les équations permettant de connaître les propriétés de la biomasse et du gaz de synthèse.

Tableau 4.4 : Résumé des équations de propriétés de la biomasse et du gaz de synthèse

Équation	Unités	Nom
$PCS = 0.3491 [C_C] + 1.1783 [C_H] + 0.1005 [C_S]$ $+ 0.1034 [C_O] + 0.0151 [C_N] + 0.0211 [C_{ash}]$	kJ/kg	Pouvoir calorifique de la biomasse
$PCS = 0.1275 [H_2] + 0.1263 [H_2] + 0.3982 [H_2]$		Pouvoir calorifique du gaz de synthèse
$\phi = \frac{\dot{m}_{ox}}{\dot{m}_{comb} SR}$	-	Rapport d'équivalence
$SR = \left(\frac{C_C}{12} + \frac{C_H}{4} - \frac{C_O}{32} \right) \left(1 + \frac{79}{21} \right) \left(1 - \frac{C_{ash}}{100} \right) \frac{28.84}{100}$	-	Rapport stoechiométrique

5 Méthodologie expérimentale

5.1 Réacteur

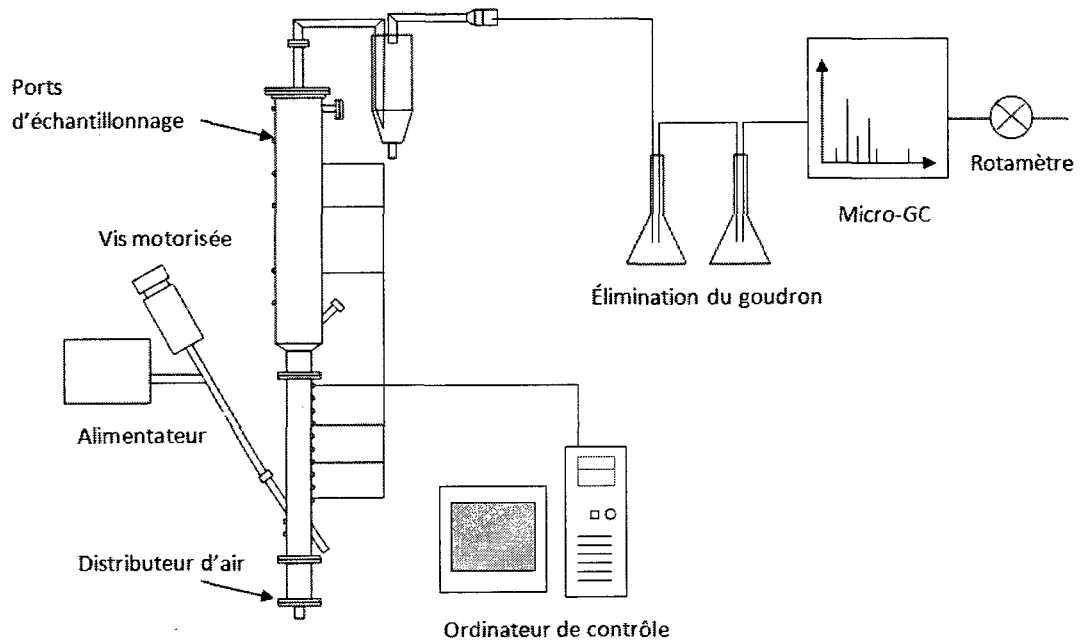


Figure 5.1 : Schéma du montage du gazogène expérimental

Le réacteur utilisé pour les expériences de gazéification consiste en un lit fluidisé fait en acier inoxydable et a une hauteur de lit et de zone d'emportement de 0.75 m et 0.9 m respectivement. Les diamètres internes du lit et de la zone de désengagement sont de 0.078 m et 0.15 m, respectivement. Le réacteur a trois régions de chauffage indépendantes qui sont contrôlées par un ordinateur pour ajuster la température de l'agent fluidisant, le lit et la zone d'emportement. Le profil de température peut être mesuré par un ensemble de 5 thermocouples disposés le long de l'axe du réacteur. Le lit consiste en des particules de silice ayant un diamètre moyen de 333 μm et une densité de 2650 kg/m^3 . La vitesse minimale de fluidisation aux conditions standards a été

mesurée à 0.08 m/s. Le temps de résidence des gaz dans le réacteur est entre 2 et 4 secondes. Cinq ports d'échantillonnage répartis le long de l'axe du réacteur permettent de déterminer le profil de concentration du gaz. Les particules sont éliminées du gaz de sortie par l'utilisation d'un cyclone. Le goudron est éliminé par condensation lors d'un bullage dans deux erlenmeyers remplis d'eau. La concentration des constituants du gaz de synthèse peut être déterminée à l'aide d'un chromatographe en phase gazeuse (Varian micro-gc 4900) équipé d'un détecteur de conductivité thermique et de deux colonnes (Molecular Sieve et Porapak). La biomasse est introduite sur le dessus du lit à l'aide d'un alimentateur de biomasse et d'une vis d'Archimède motorisée (7 hp) permettant d'acheminer la biomasse jusque dans le lit et de contrôler le débit de celui-ci. Un système à vide est utilisé afin de pomper le gaz de synthèse depuis le port d'échantillonnage jusqu'au chromatographe en phase gazeuse. Un rotamètre installé entre le chromatographe et la prise de vide permet de contrôler le débit de gaz de synthèse prélevé. La biomasse utilisée consiste en du bois de démolition composé de différentes essences de bois et déchiqueté avec un diamètre moyen de 2 mm. L'agent fluidisant utilisé est de l'air pressurisé. Les conditions d'opération sont une température de lit de 800 °C et une zone d'emportement de 740 °C.

5.2 Biomasse

La biomasse utilisée pour réaliser les expériences de gazéification et de caractérisation par thermogravimétrie analytique consiste en :

- Bois de démolition fourni par un site de récupération et présentant trois niveaux d'humidité (sec, semi-humide et humide)
- 2 types de bardeaux d'asphalte
 - Bardeau ayant une matrice en carton
 - Bardeau ayant une matrice en fibre de verre

5.3 Caractérisation de la biomasse

5.3.1 Thermogravimétrie analytique

La thermogravimétrie analytique (TGA) permet de mesurer, à l'aide d'une microbalance, la variation de la masse de l'échantillon en fonction de la température pour différentes rampes de chauffage. Cette technique, combinée à l'analyse du gaz par chromatographie en phase gazeuse, permet de suivre l'évolution des gaz produits au cours du chauffage. Un agent oxydant est introduit dans la cavité tout en contrôlant son débit. La figure 5.2 illustre schématiquement le TGA.

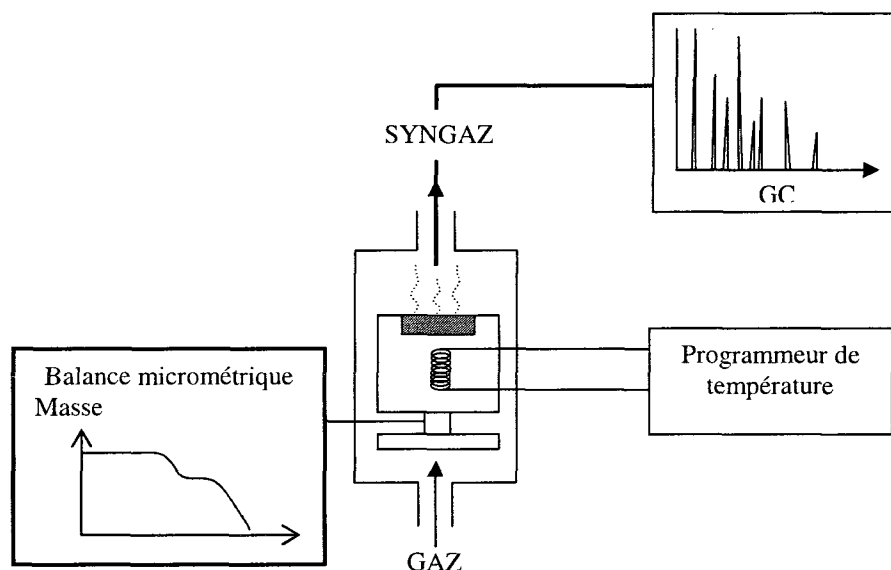


Figure 5.2 : Schéma du montage du gazogène expérimental

Cette technique, aussi appelée « proximate analysis », permet de :

- Déterminer la fraction massique d'eau dans l'échantillon ;
- Déterminer la fraction massique d'éléments volatiles ;
- Déterminer la fraction massique de cendres restantes après la volatilisation complète;
- La composition des gaz issus des réactions de pyrolyse.

Selon que le gaz est de l'azote ou de l'air, il est possible d'étudier la pyrolyse ou la combustion.

5.3.2 Mesures de granulométrie

Un analyseur de particules a été utilisé afin de déterminer la distribution de diamètre des particules de sable. Le système permet de connaître avec précision le diamètre moyen des particules et leur écart type. Cette donnée est importante puisque plusieurs paramètres du modèle utilisent le diamètre moyen des particules.

5.4 Analyse élémentaire

La composition élémentaire (ultimate analysis) de la biomasse a été déterminée à l'aide d'un appareil Fisons Instruments SPA, modèle EA1108. Cet appareil permet de déterminer quantitativement les proportions C, H, N, S dans une grande variété d'échantillons organiques et inorganiques purs (solides, liquides, huiles, etc.). Les données obtenues à l'aide de cet appareil sont ensuite utilisées pour déterminer le pouvoir calorifique du combustible et réaliser le bilan de masse sur tous les éléments duquel découlent le rapport d'équivalence et la quantité d'air nécessaire pour atteindre les conditions de gazéification. La concentration massique en oxygène a été déduite par soustraction; soit $x_O = 100 - x_C - x_H - x_N - x_S$. Cette déduction est valable dans la mesure où l'échantillon n'est constitué que des éléments C, H, O, N et S.

5.5 Mesure de la vitesse minimale de fluidisation

La mesure de la vitesse minimale de fluidisation a été réalisée à même le réacteur par l'observation de la différence de pression de part et d'autre du lit. Une jauge de pression mesure la différence de pression de l'air entre l'entrée du réacteur et le dessus du lit. À mesure que la vitesse du fluide augmente, la pression augmente linéairement. En effet la différence de pression que subit le gaz provient de la force de traînée engendrée par le gaz sur les particules pour soulever le lit. Lorsque la vitesse du gaz atteint la vitesse

minimale de fluidisation, il n'y a plus d'élévation de la perte de pression, et ce, même si la vitesse du gaz augmente. Par cette technique, en sachant avec précision le débit volumique circulant, il est alors aisé de connaître la vitesse minimale de fluidisation à différentes températures. De plus, lorsque l'élévation du lit est mesurée en même temps que la différence de pression, alors il est possible d'en déduire la porosité du lit.

5.6 Mesures de concentrations en polluants atmosphériques

Le GC-MS de Varian est un chromatographe en phase gazeuse (CP-3800) combiné à un spectromètre de masse (Saturn 2200). Cet appareil a été utilisé afin de déterminer de façon qualitative la présence d'éléments nocifs pour l'environnement dans les gaz de combustion issus des échantillons de biomasse à l'étude. Les expériences réalisées ont permis de déterminer la présence des polluants suivants :

- Composés organiques volatiles
- Furanes
- Hydrocarbure aromatique polycycliques (HAP)
- Composés soufrés
- Composés chlorés

6 Présentation et discussion des résultats

6.1 Caractérisation de la biomasse

Le tableau 6.1 contient les caractéristiques des combustibles étudiés. Il est à noter que pour le bardeau d'asphalte, les roches formant le revêtement ont été enlevées de l'échantillon.

Tableau 6.1: Caractéristiques des combustibles étudiés

Combustible / Caractéristiques	Bois			Bardéau d'asphalte	
	Sec	Semi-sec	Humide	Type I	Type II
Dimensions (mm)	20-120 (longueur) 10-20 (diamètre) 4 (diamètre post- traitement)	20-120 (longueur) 10-20 (diamètre) 4 (diamètre post- traitement)	20-120 (longueur) 10-20 (diamètre) 4 (diamètre post-traitement)	4 mm (diamètre post-traitement)	4 mm (diamètre post-traitement)
Densité (g/cm ³)	1,69	1,8	2,2	3,21	3,64
Détails	Bois de démolition séché à l'intérieur	Bois de démolition commençant le séchage à l'intérieur	Bois de démolition pris à l'extérieur	Matrice de fibre de verre	Matrice de carton

Le tableau 6.2 contient les caractéristiques et l'analyse élémentaire de la biomasse. Les résultats pour le bois de construction sont conformes aux données relatées dans la littérature. Le bardeau d'asphalte de type I se caractérise par une teneur plus faible en carbone que pour le bois alors que celui du type II a une teneur plus élevée en carbone. Ceci peut s'expliquer par le fait que le bardeau de type I est constitué d'une matrice en fibre de verre alors que le bardeau de type II est constitué d'une matrice en carton. Ainsi la présence d'atomes de silicium dans le bardeau diminue la fraction d'atomes de carbone. Il est à noter que le spectromètre de masse utilisé pour les expériences n'a pas pu prendre en compte les atomes d'oxygène en raison d'un dysfonctionnement. Ainsi l'oxygène a pu être obtenu par différence pour le bois, sachant que celui-ci est toujours constitué des éléments C, H, N, O et S. Cependant, pour le bardeau d'asphalte, il n'est pas possible d'en déduire de la même façon la fraction massique d'oxygène étant donné la présence d'autres éléments (silicium).

Tableau 6.2: Propriétés de la biomasse et analyse élémentaire

Composant/ Propriété	Fraction massique (%) pour le bois sec	Fraction massique (%) pour le bois humide	Fraction massique (%) pour le bardeau d'asphalte de type I	Fraction massique (%) pour le bardeau d'asphalte de type II
Proximate analysis				
Moisture	12,0	34,0	0,0	0,0
Total solids	88,0	66,0	100,0	100,0
Volatile ^a	81,1	81,4	55,0	62,0
Char ^a	18,1	17,8	22,9	29,8
Ash ^a	0,8	0,8	22,1	8,2
Ultimate Analysis				
C	45,22	45,22	34,5	62,2
H	7,3	7,3	3,43	7,6
O	46,98	46,98	-	-
N	0,5	0,5	0,46	0,38
S	0	0	2,87	3,6

^aBase sèche

6.2 Pouvoir calorifique

Le pouvoir calorifique des quatre types de biomasse à l'étude a été déterminé à l'aide de la composition élémentaire et la relation 89. Il est intéressant de noter que le bardeau d'asphalte de type II présente un pouvoir calorifique supérieur beaucoup plus élevé que le bois. Ceci est dû à deux raisons : la matrice en carton et la présence de goudron en tant qu'éléments constitutifs du bardeau. Pour le bardeau, la présence de roches n'a pas été prise en compte dans le présent calcul ; en effet, les roches du revêtement externe ont été retirées lors de l'analyse élémentaire car celles-ci n'interviennent pas dans les réactions chimiques.

Tableau 6.3: Pouvoir calorifique inférieur et supérieur du bois et du bardeau d'asphalte

Combustible	PCI _{anhydre} [MJ/kg]	PCI _{humide} [MJ/kg]	PCS _{humide} [MJ/kg]
Bois de démolition (sec)	18,3	15,4	19,4
Bois de démolition (humide)	18,3	11,3	19,8
Bardeau d'asphalte (type I) ^a	15,9	15,9	16,3
Bardeau d'asphalte (type II) ^a	30,4	30,4	31,2

^aSur base dans roche

6.3 Granulométrie du sable

Le sable utilisé dans le gazogène a un diamètre moyen de 333 μm et présente la distribution de diamètre suivante. La connaissance de la granulométrie permet de connaître la vitesse minimale de fluidisation.

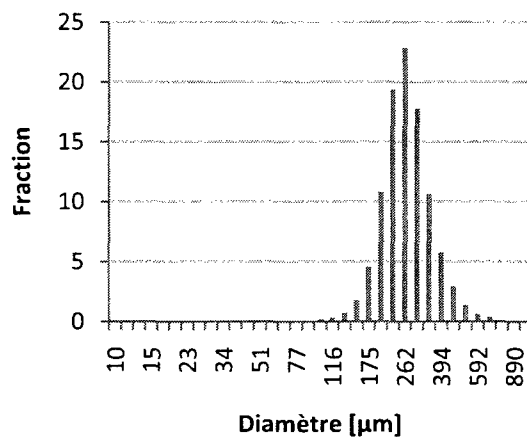


Figure 6.1: Granulométrie du sable

6.4 Vitesse minimale de fluidisation

La vitesse minimale à 25°C et 800°C a été déterminée par l'observation de la perte de charge entre l'entrée et la sortie du réacteur en fonction de la vitesse superficielle. Lorsque la perte cesse de varier en fonction de la vitesse superficielle, alors cela signifie que la vitesse minimale de fluidisation a été atteinte.

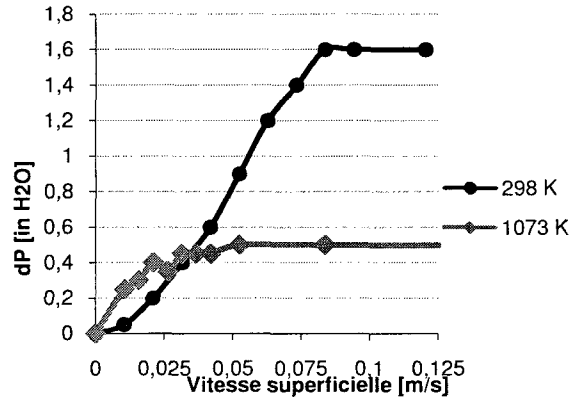
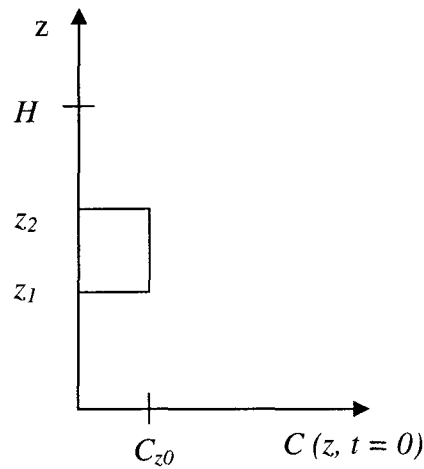


Figure 6.2: Perte de charge en fonction de la vitesse superficielle à 298 K et 1073 K.

En adoptant la convention que la vitesse minimale de fluidisation du lit est atteinte à 90% de la perte de charge totale, alors on trouve les vitesses : $u_{mf,298}^{exp} = 0.075$ m/s et $u_{mf,298}^{1073} = 0.037$ m/s. Ces mesures sont conformes avec les résultats de l'équation 3, laquelle donne : $u_{mf,298}^{calc} = 0.081$ m/s et $u_{mf,1073}^{calc} = 0.0373$ m/s.

6.5 Modélisation du mélange des particules

Pour vérifier la validité de la formulation du modèle *CCBM* (voir annexe 3), il est nécessaire de considérer la condition initiale suivante à $t = 0$ avec les données expérimentales [81]:



Ainsi la condition initiale s'écrit :

$$C_1(z, t = 0) = C_2(z, t = 0) = f(z) = \begin{cases} C_0, & z_1 < z < z_2 \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Une analyse de sensibilité sur le pas de temps et sur le pas d'espace a permis de démontrer que la précision du calcul dépend fortement de la grosseur du pas de temps et d'espace. Plusieurs calculs ont été effectués à plusieurs pas de temps afin de déterminer la discrétisation optimale. Le tableau 6.4 contient les pas de temps et d'espace qui donnent un temps de calcul et une précision raisonnable. Le critère de convergence de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) est de 0.2.

Tableau 6.4 : Pas de temps et temps de calcul

Pas de temps (s)	0.0145
Pas d'espace (m)	0.0052
Temps de calcul (s)	8.39

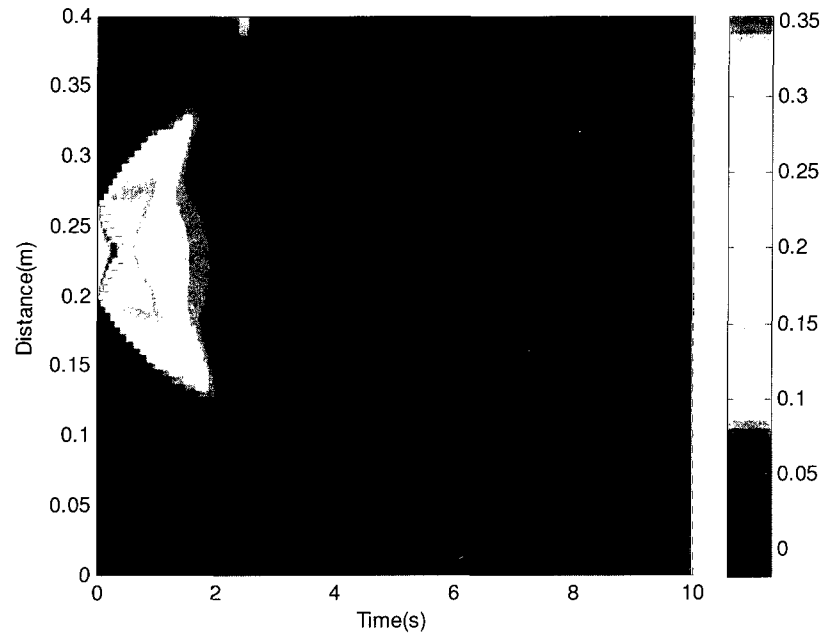


Figure 6.3: Profil axial de concentration en fonction du temps. $u_1=0.07$ m/s, $u_2=-0.06$ m/s, $K_w=1.8$ s⁻¹.

Les résultats montrent que le modèle vérifie ceux de Radmanesh [51]. En quelques secondes la concentration du lit devient homogène. Cependant, les résultats de simulation approchent les résultats expérimentaux avec un coefficient de transfert de masse de 1.8 s⁻¹ au lieu de 0.8 s⁻¹ (Radmanesh). Ce coefficient se rapproche davantage des résultats de Lim [81, 82] et Hoffman [83].

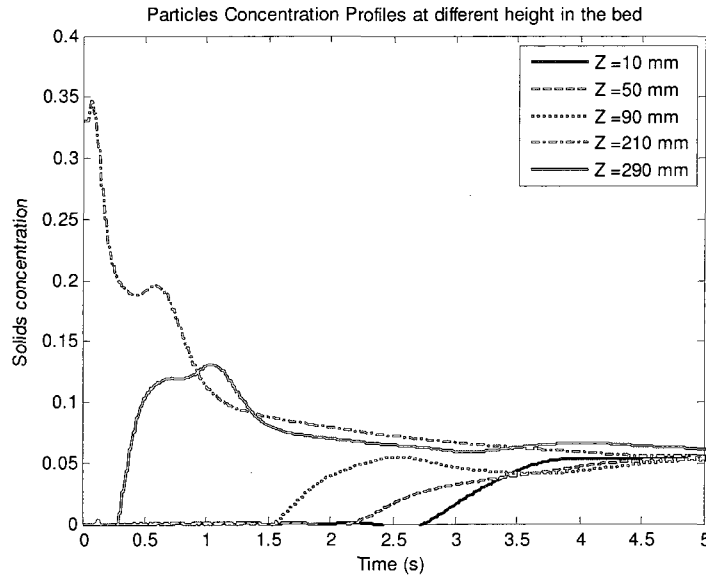


Figure 6.4: Profil axial de concentration en fonction du temps

L'ajout des réactions gaz-solide $R1$, $R2$ et $R3$ a comme effet de faire diminuer la concentration de solides dans les deux phases et de contribuer à la conversion du carbone. Étant donné que l'algorithme de calcul nécessite de fixer les conditions aux frontières en $z = 0$, il est nécessaire de fixer la concentration initiale de solides en $z = 0$ qui fait en sorte que la conversion est complète dans la phase ascendante lorsque les particules de char arrivent au dessus du lit. Une méthode de tir a été utilisée afin de déterminer la concentration initiale ($X_1(0)$ et $X_2(0)$) permettant de respecter les valeurs observées en $z = H$. Ainsi le problème doit respecter la condition suivante en $z = H$:

$$X_1(H) = 1$$

$$X_2(H) = 0$$

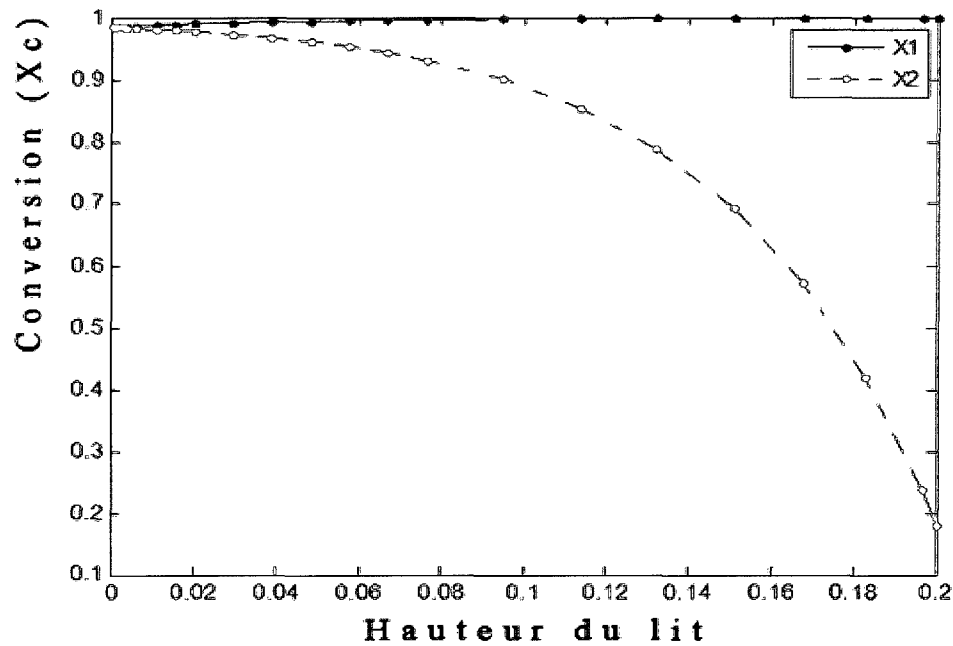


Figure 6.5: Méthode de tir. Conversion carbone en fonction de la hauteur du lit (m) dans les phases ascendantes et descendantes.

Il a été démontré que la méthode de tir s'avère difficile à mettre en œuvre lorsque le débit de biomasse n'est pas assez élevé ou lorsque le débit d'oxygène est élevé. En effet, cela a comme impact que la conversion est très rapide au dessus du lit de sorte que la méthode de tir présente de la difficulté à déterminer la valeur de $X_1(0)$ et $X_2(0)$ qui respecte la condition en $z = H$. Ceci démontre que lorsque la biomasse est insérée sur le dessus du lit, les particules réagissent très rapidement étant donnés les taux de réaction élevés des réactions $R1$, $R2$ et $R3$. Ainsi la biomasse n'a pas le temps de rentrer en profondeur dans le lit. Il est alors possible de supposer une réaction instantanée, ce qui évite d'utiliser la méthode de tir. Cependant, lorsque les particules ont un diamètre plus grand, celles-ci entrent plus en profondeur dans le lit et il est alors nécessaire d'utiliser la méthode du tir.

6.6 Hydrodynamique et phases

Le modèle prend en compte la migration du gaz entre les phases bulle et émulsion. Le gradient de concentration engendre une migration du gaz. Le taux de ce transfert de masse dépend du coefficient de transfert de masse K_{be} . La figure 6.6 illustre le cas simple où de l'air est injectée à la base du lit à une vitesse superficielle supérieure à la vitesse minimale de fluidisation. Initialement, tout l'air est contenu dans la phase émulsion. Le modèle à deux phases implique que l'excédent de gaz dans la phase émulsion par rapport à la condition minimale de fluidisation va dans la phase bulle. La figure 6.6 illustre que le modèle prend bien en compte le phénomène. La concentration a tendance à s'équilibrer dans les deux phases. Il est à noter que la fraction volumique de N_2 et de O_2 est conservée.

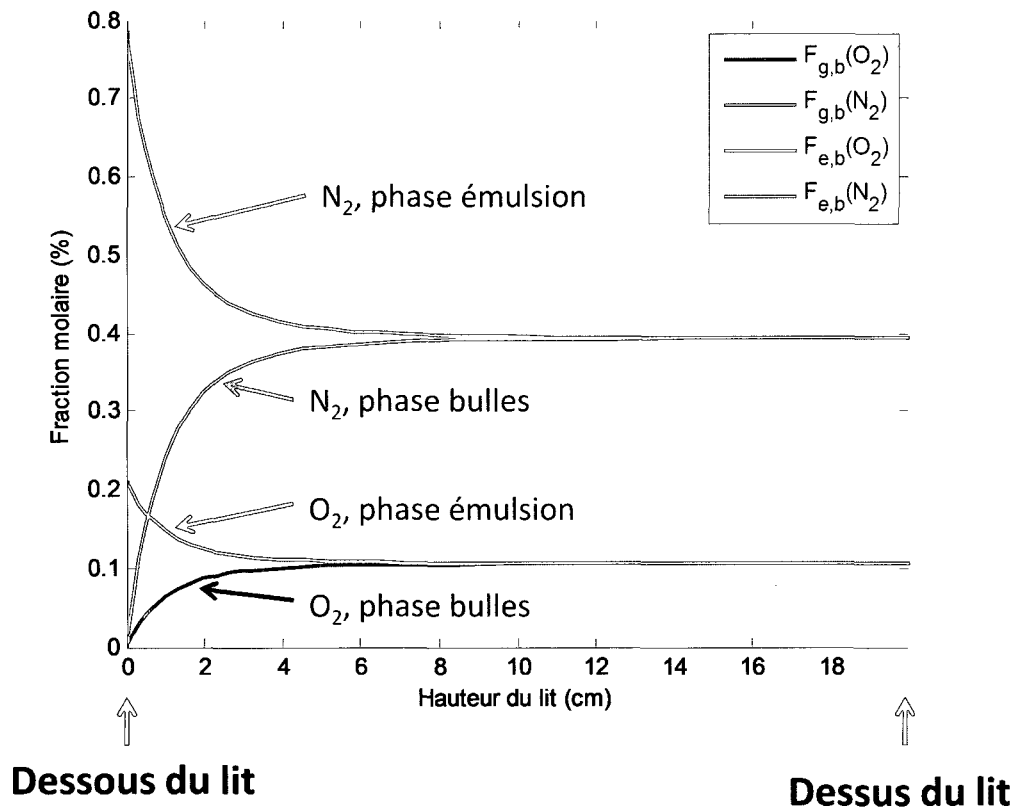


Figure 6.6: Débit molaires des deux phases au travers du lit. (air seulement).

6.7 Conditions opératoires

Les mesures effectuées sur le réacteur à différentes conditions opératoires permettent de valider le modèle lorsque celui-ci est soumis aux mêmes conditions. Les expériences suivantes ont été réalisées :

- Variation du rapport d'équivalence
- Variation de la température d'opération

Le tableau 6.5 résume les conditions opératoires pour les différentes expériences réalisées ainsi que les compositions du gaz de synthèse.

Tableau 6.5: Conditions opératoires et composition du gaz de synthèse (base sèche)

Expérience	T_{in} (°C)	T_f (°C)	m_b (g/min)	u^* (m/s)	ER	Composition du gaz (base sèche %)				
						H ₂	CH ₄	CO	CO ₂	N ₂
1	800	780	12,0022	0,16	0,13	14	5	27	7	47
2	800	765	12,0022	0,17	0,22	15	4	24	12	45
3	810	780	12,0022	0,18	0,23	13	4	20	12	51
4	812	785	12,0022	0,24	0,24	11	3	24	13	49
5	790	775	12,0022	0,35	0,32	9	2	19	13	55
6	802	750	19,3904	0,15	0,48	6	2	5	12	71

6.8 Profils de concentration

Le modèle permet de calculer le profil de concentration selon que la biomasse est alimentée en dessous ou au dessus du lit. Le caractère instantané des réactions de combustion est mis en évidence sur la figure 6.7. Les particules de char sont rapidement oxydées, relâchant ainsi du monoxyde de carbone et la vapeur d'eau (R1, R2, R3). Par la suite, la réaction *shift* (R4), beaucoup plus lente, permet de reformer la vapeur d'eau et le CO en H₂ et en CO₂. Cette réaction, quoique très lente, est très importante et est à la base de la formation de l'hydrogène dans le gaz de synthèse. La réaction de combustion de l'hydrogène (R6) étant plus rapide que les réactions de combustion du

CO (R5) et du méthane (R7), ceci implique que l'oxygène présent dans le gaz réagit davantage avec l'hydrogène. Ainsi le CH_4 demeure à peu près stable dans le lit (et ce même en présence de R11 car cette réaction est très lente). La quantité importante de CO qui résulte des réactions hétérogènes réagit alors avec la vapeur d'eau (H_2O) pour former l'hydrogène. Les simulations ont également démontré l'importance du craquage du goudron et de sa combustion. La première permet de générer des quantités importantes de produits utiles faisant augmenter le pouvoir calorifique du gaz de synthèse. La deuxième consomme une partie de l'oxygène avant que celui-ci n'oxyde les autres gaz utiles. Plusieurs autres réactions moins importantes, mais tout de même incluses dans le modèle, telles que la combustion du CH_4 , C_2H_4 et C_2H_6 , ont un impact peu significatif sur la concentration des gaz puisque leur taux de réaction est environ dix fois moins important que la réaction *shift* (R4).

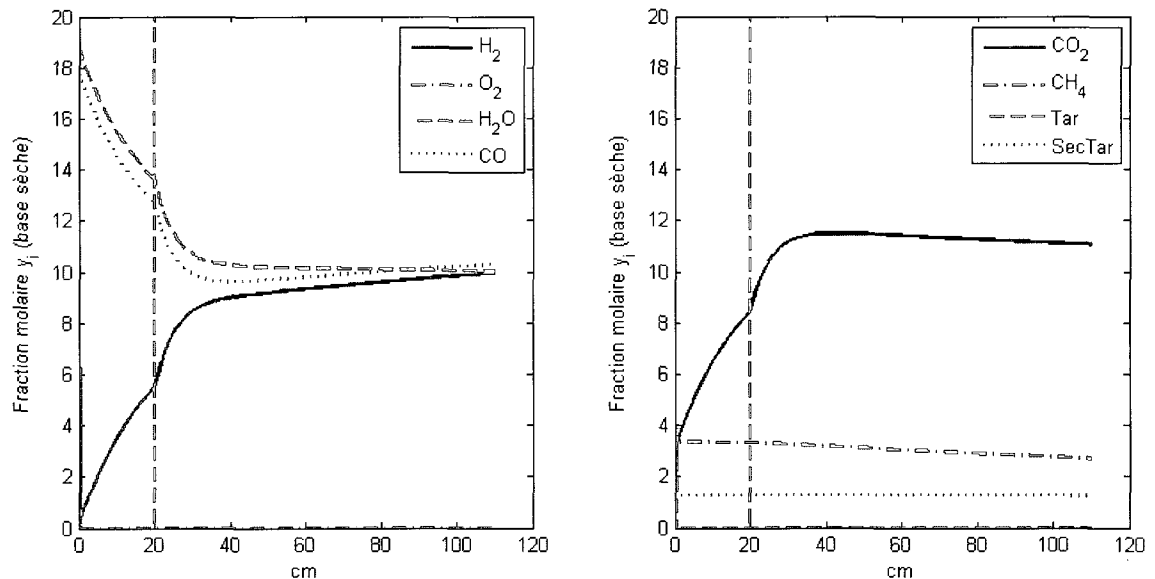


Figure 6.7: Profil de concentration pour une alimentation par le bas. $\text{ER}=0.25$.

$T_b=800^\circ\text{C}$, $T_f=740^\circ\text{C}$, $u=0.2$ m/s. Le lit est situé entre 0 et 20 cm, la zone d'empatement est situé entre 20 cm et 110 cm.

La figure 6.8 illustre la rapidité avec laquelle se font les réactions hétérogènes et homogènes lorsque la biomasse est introduite dans le réacteur. L'hydrogène issu de la réaction de pyrolyse réagit rapidement avec l'oxygène, limitant ainsi la combustion du goudron, au profit de son craquage.

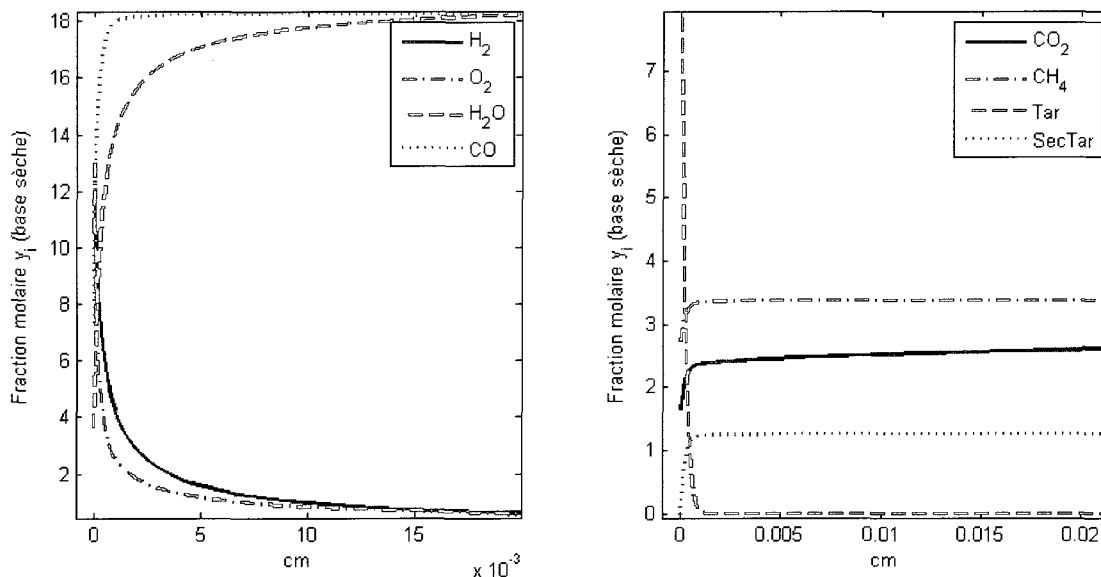


Figure 6.8: Profil agrandi de la concentration pour une alimentation par le bas.

ER=0.25. $T_b=800^\circ\text{C}$, $T_f=740^\circ\text{C}$, $u=0.2$ m/s.

La figure 6.9 illustre le profil de concentration des gaz lorsque la biomasse est insérée au dessus du lit.

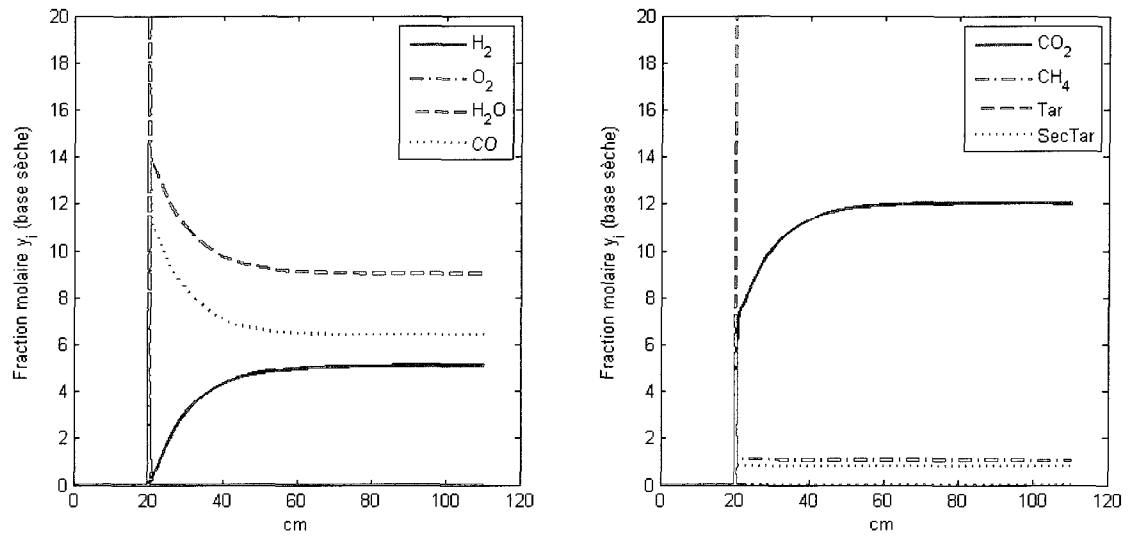


Figure 6.9: Profil de concentration pour une alimentation par le dessus. $ER=0.25$.

$T_b=800^\circ\text{C}$, $T_f=740^\circ\text{C}$, $u=0.2$ m/s. Le lit est situé entre 0 et 20 cm, la zone d'empatement est située entre 20 cm et 110 cm.

6.9 Effet du rapport d'équivalence

6.9.1 Pouvoir calorifique

L'augmentation du rapport air/combustible favorise les réactions de combustion au détriment du CO , H_2 et CH_4 . Les résultats de la simulation sont conformes aux données expérimentales et celles reportées dans la littérature [74, 84-86].

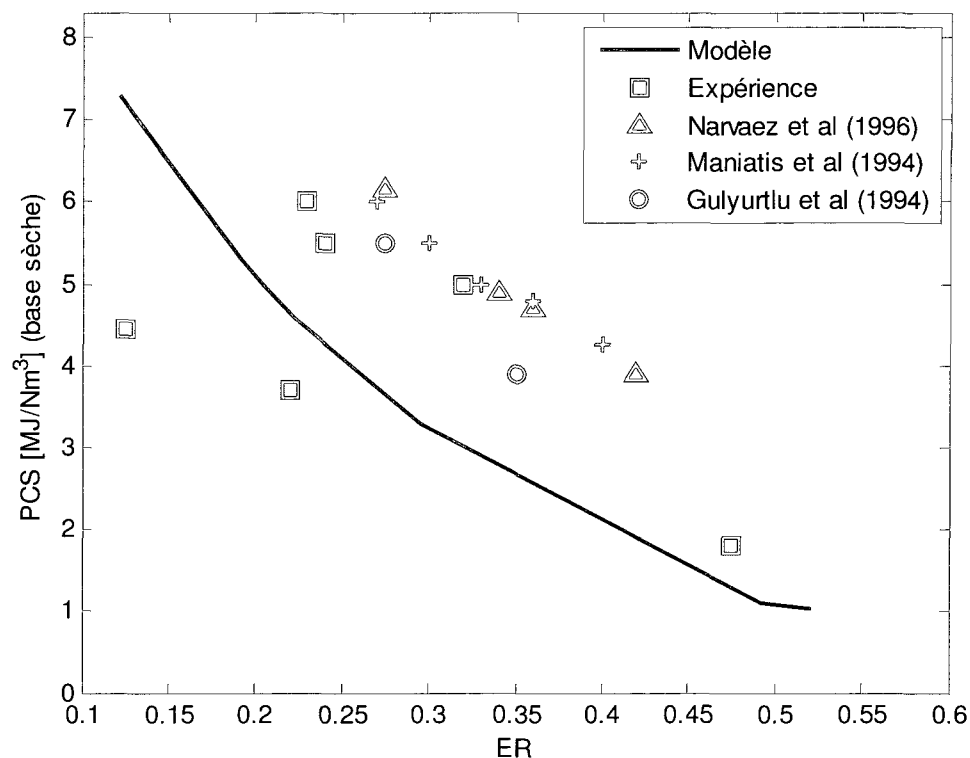


Figure 6.10: Pouvoir calorifique supérieur en fonction du rapport d'équivalence.

Les données expérimentales démontrent que le rapport d'équivalence idéal lors d'une gazéification à l'air se situe autour de 0.25. En effet, plus ER tend vers zéro, plus le procédé tend vers celui de la pyrolyse; alors des quantités importantes d'huile et de charbon de bois sont alors produit au détriment du gaz de synthèse. Bien que la valeur calorifique soit plus grande lorsque ER diminue, le débit de gaz est alors moins élevé. La valeur optimale du rapport d'équivalence pour un réacteur utilisant l'air comme agent fluidifiant est donc entre 0.2 et 0.4.

6.9.2 Concentrations du gaz

La concentration des gaz en fonction du rapport d'équivalence renseigne sur les cinétiques de réaction en jeu et permet de connaître la valeur calorifique du gaz de synthèse en utilisant les relations empiriques précédemment énoncées. La figure 6.11 illustre les résultats de simulations comparés aux points expérimentaux.

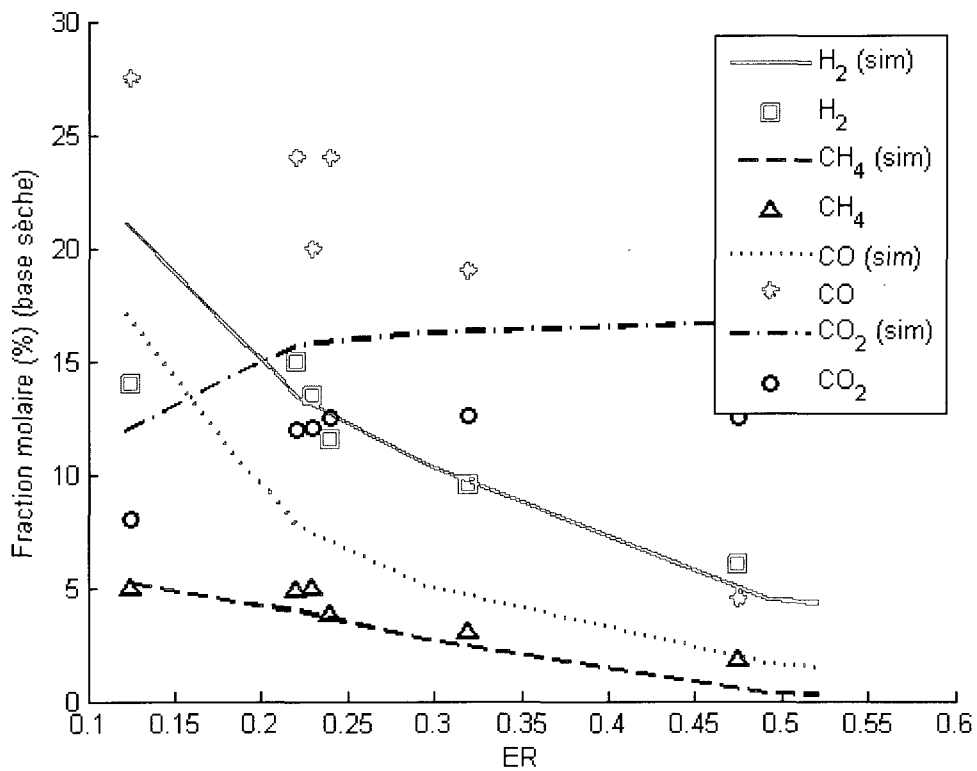


Figure 6.11: Concentration de H_2 , CH_4 , CO et CO_2 en fonction du rapport d'équivalence

De façon qualitative, les données simulées représentent bien le phénomène observé en pratique. En effet, une augmentation de l'apport en oxygène a comme effet de favoriser les réactions de combustion, d'où la baisse de H_2 , CH_4 et CO et la hausse des produits de combustion tels que H_2O et CO_2 . De façon quantitative, les concentrations de méthane et d'hydrogène se rapprochent des points expérimentaux. Le CO_2 produit excède de

30% les valeurs expérimentales mais présente tout de même la même tendance. La simulation donne des valeurs de 2 à 4 fois trop élevées pour le monoxyde de carbone. Ces valeurs erronées peuvent être le résultat d'une cinétique de réaction inadéquate pour la combustion du monoxyde de carbone (R5). Quatre cinétiques de réactions différentes prises dans la littérature [17, 54, 87, 88] ont été utilisées afin de corriger cet écart mais aucune n'a donné des résultats satisfaisants. Plusieurs cinétiques de réaction reportées dans la littérature sont très différentes les unes des autres et certaines sont erronées en raison de mauvaises conversions d'unité, par un manque d'informations quant aux unités utilisées pour les cinétiques de réaction et par des hypothèses mal documentées.

6.9.3 Production de gaz

La quantité de gaz générée par rapport à la quantité de biomasse gazéifiée est une donnée importante qu'il est nécessaire de modéliser puisqu'elle peut être utilisée dans la conception du réacteur ou dans l'évaluation du potentiel énergétique du gaz de synthèse pour une quantité de biomasse donnée. Les simulations donnent des résultats se rapprochant à près de 25% des résultats reportées dans d'autres publications. La raison de cet écart peut être due au fait que la biomasse utilisée n'est pas la même que les autres publications. De façon qualitative, le modèle représente bien les conditions expérimentales. En effet, plus le rapport d'équivalence augmente, plus le dioxyde de carbone est produit, au détriment des autres gaz (CH_4 , H_2 et CO). De plus, davantage de goudron est alors oxydé, donnant ainsi lieu à une plus grande quantité de gaz produit.

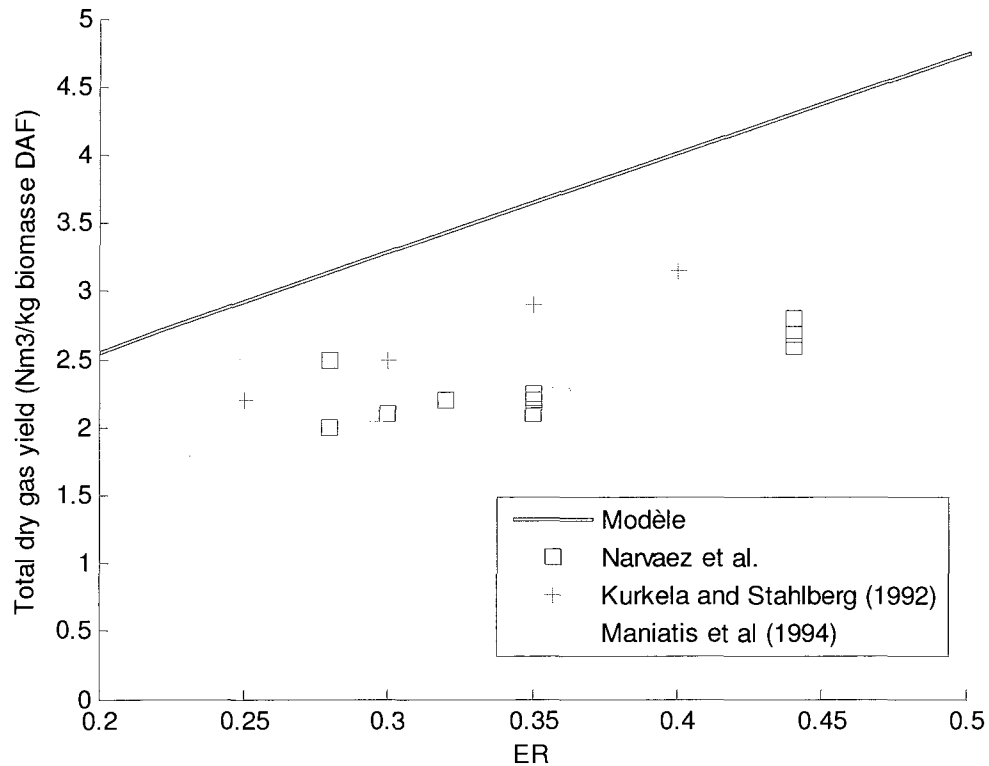


Figure 6.12: Taux de conversion gaz/biomasse en fonction du rapport d'équivalence

6.9.4 Teneur en goudron

Le goudron a un impact important puisque celui-ci se condense à des températures inférieures à 400 °C et contribue ainsi à l'encrassement des équipements. Le goudron provient des réactions de pyrolyse et est sous forme gazeuse. La teneur en goudron dans le gaz de synthèse a été simulée et a été comparée à plusieurs données relatées dans littérature. Il s'avère que l'augmentation du rapport d'équivalence diminue la teneur en goudron étant donné que plus d'oxygène est présent pour entretenir les réactions de combustion.

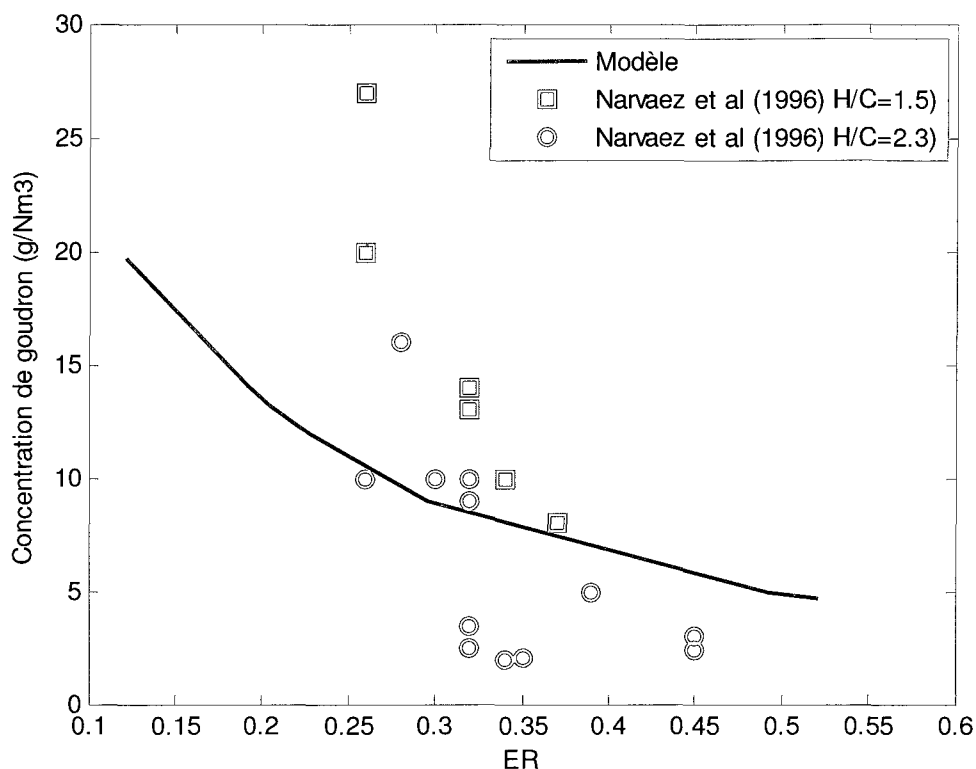


Figure 6.13: Concentration de goudron en fonction du rapport d'équivalence.

6.10 Effet de la température

6.10.1 Pouvoir calorifique supérieur

La température a un effet sur les cinétiques de réaction. Celle-ci est prise en compte dans le facteur pré-exponentiel de la cinétique de réaction. L'élévation de la température du lit augmente le pouvoir calorifique supérieur (PCS) du gaz de synthèse. Les données expérimentales donnent une élévation moyenne de 0.7 MJ/Nm³ par tranche de 100°C, le modèle donne plutôt une élévation de 0.2 MJ/Nm³. Le modèle sous-estime légèrement le PCS d'au plus 20%. La raison de l'écart peut être due à certaines

cinétiques de réaction utilisées qui sont imprécises, voire erronées. Néanmoins, le modèle représente bien le phénomène observé.

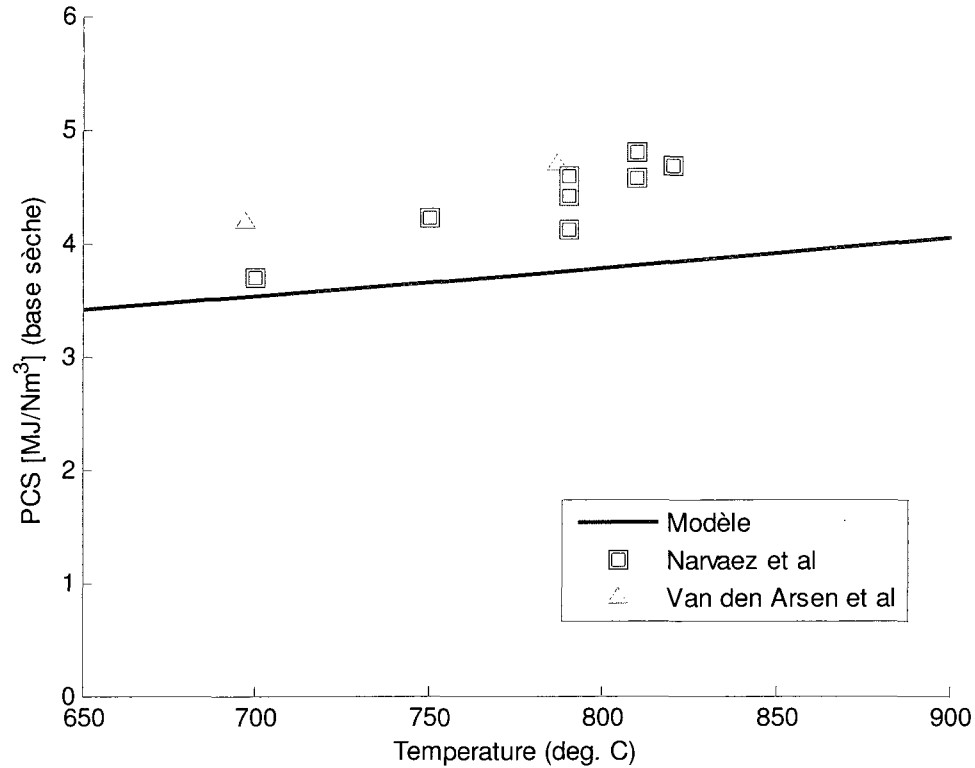


Figure 6.14: Pouvoir calorifique supérieur du gaz de synthèse en fonction de la température du lit.

6.10.2 Concentration des gaz

L'augmentation de la température a comme effet d'accroître les cinétiques de réaction. Tel qu'illustré en annexe 6, l'élévation de température a comme effet d'augmenter les cinétiques de réaction de H_2 , CO et CH_4 . Cependant, la réaction *shift* varie très peu en fonction de la température en raison de sa faible énergie d'activation, ce qui a pour effet que le CO augmente et que le H_2 et le CO_2 diminuent à mesure que la température augmente. De façon qualitative, le modèle reproduit le phénomène, excepté pour

l'hydrogène. De façon quantitative le modèle s'approche des valeurs expérimentales pour le CO_2 et le CH_4 , cependant il donne des valeurs erronées pour le H_2 et le CO .

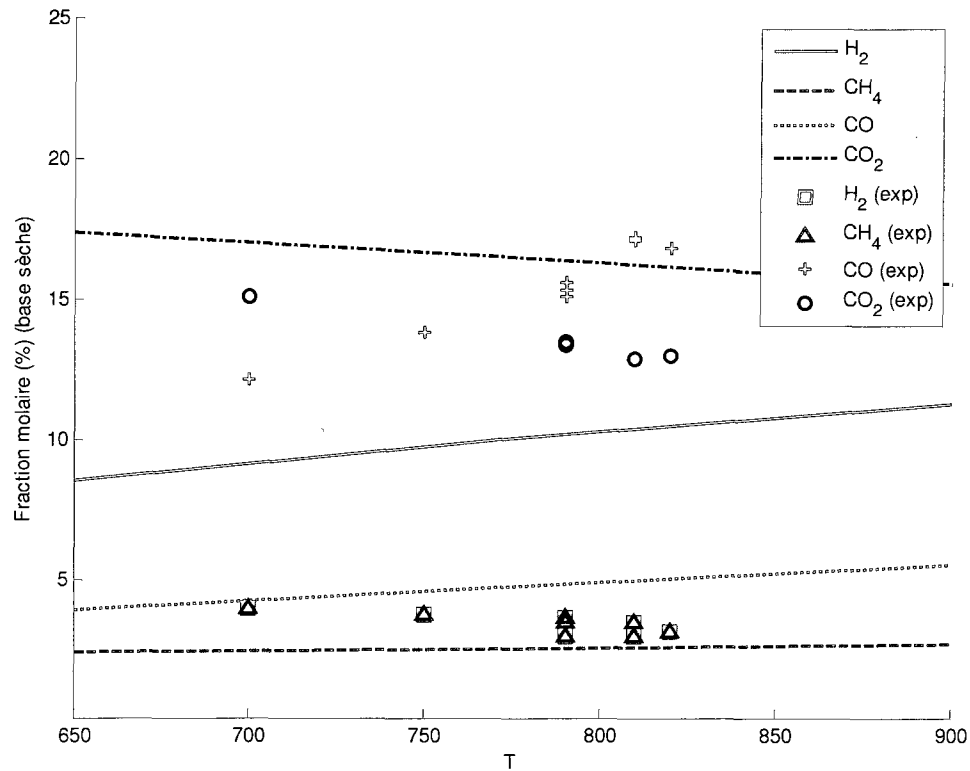


Figure 6.15: Concentration des gaz en sortie du réacteur en fonction de la température du lit

6.10.3 Production de gaz

La production de gaz de synthèse par unité de biomasse ne varie que très peu en fonction de la température. En effet, la variation de la température ne fait que déplacer l'équilibre de la réaction sans toutefois avoir un impact sur la quantité de gaz produit.

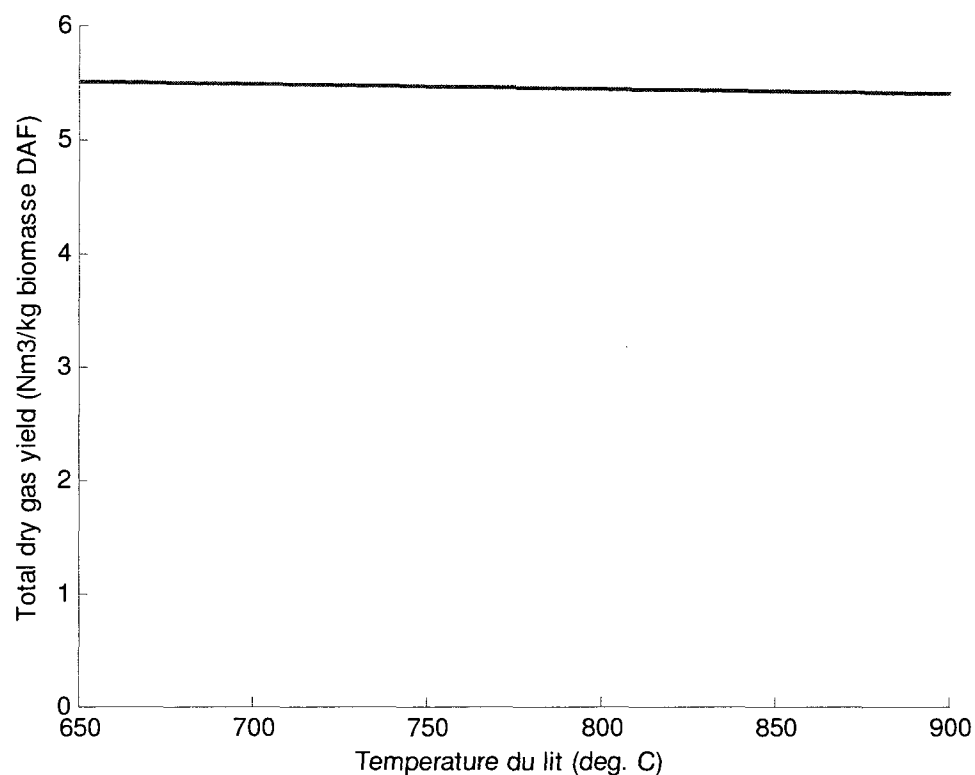


Figure 6.16: Taux de conversion gaz/biomasse en fonction de la température du lit.

6.10.4 Concentration en goudron

Étant donné que la cinétique de réaction de la combustion du goudron est dépendante de la température, alors l'élévation de température fait augmenter le taux de réaction. Les résultats de simulation donnent une concentration de goudron de 4-8 g/Nm³ entre 650°C et 900°C, soit légèrement inférieure aux données expérimentales [77, 86, 89, 90] reportées dans la littérature. La figure 6.17 illustre la variation de la concentration de goudron dans le gaz de synthèse en fonction de la température.

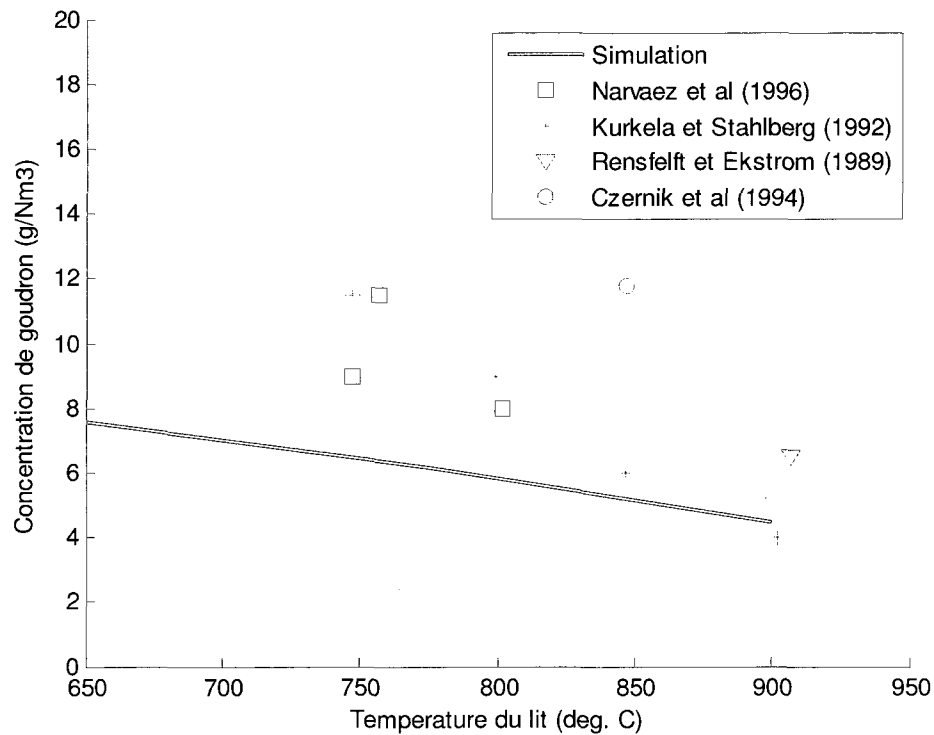


Figure 6.17: Concentration de goudron dans le gaz de synthèse en fonction de la température du lit

6.11 Émissions

Des analyses effectuées à l'aide du GC-MS ont permis de déterminer de façon qualitative la présence de polluants issus de la combustion du gaz de synthèse issus de la combustion du bardeau d'asphalte en thermogravimétrie analytique. Les analyses ont permis d'identifier (aucune quantification réalisée) les composés suivants :

- COV (aromatisés benzéniques)
- Benzène
- Alcènes & aldéhydes insaturés (cycles ouverts)
- Composés soufrés

De plus, des traces de furanes (cyclopentène, cyclopentadiène) et de HAP ont été mesurées. Les HAP, généralement présents dans la combustion du bois peuvent provenir du goudron ou de la combustion de la matrice supportant le bardeau, laquelle est en papier. Aucun composé chloré n'a été identifié, éliminant ainsi certaines réactions très corrosives. Les composés soufrés proviennent de la présence de soufre dans le goudron qui a réagit avec H_2 ou O_2 en présence de température élevées. Des analyses plus poussées devraient être réalisées pour quantifier la concentration des polluants.

7 Conclusion

La gazéification de la biomasse offre des avantages intéressants qui permettent de compléter l'éventail de solutions disponibles pour résoudre les enjeux énergétiques et environnementaux de nos sociétés modernes. De ce fait, la gazéification est vouée à un bel avenir et de nombreux projets pilotes voient le jour dans plusieurs pays. Cependant, le passage à l'étape industrielle fait face à de nombreux problèmes techniques importants ; de mauvais design de réacteurs, une mauvaise compréhension des phénomènes chimiques, un contenu calorifique trop faible et des performances inadéquates des réacteurs sont quelques exemples des défis que les ingénieurs devront résoudre. Des recherches au niveau fondamental sont donc nécessaires pour assister les scientifiques dans la résolution des problèmes technologiques.

Le présent travail de recherche et développement a permis de réaliser un modèle phénoménologique basé sur l'hydrodynamique des lits fluidisés et les cinétiques de réactions homogènes et hétérogènes. Le modèle considère deux phases, une phase émulsion et une phase bulle dans lesquelles surviennent les réactions chimiques et un transfert de masse entre celles-ci.

Les résultats de simulations comparés aux données expérimentales ont permis de valider le modèle. La concentration des gaz, la conversion de biomasse en gaz, le pouvoir calorifique supérieur et la concentration de goudron en fonction du rapport d'équivalence sont reproduits et se rapprochent des valeurs expérimentales. Pour différentes températures de lit, ces mêmes paramètres sont moins bien reproduits et des écarts sont observés. Plusieurs raisons peuvent expliquer cet écart mais la piste de cinétiques de réactions erronées doit être priorisée. Néanmoins, le modèle constitue un avancement considérable puisque celui-ci permet de reproduire avec un bon niveau de précision les valeurs expérimentales et il vérifie les tendances observées. Ainsi l'aspect phénoménologique est bien pris en compte.

La toxicité des produits de combustion a fait l'objet d'analyses qualitatives et il a été possible de déterminer la présence de constituants néfastes pour l'environnement, si ceux-ci se retrouvent au dessus des seuils d'émission réglementaires. Une analyse quantitative doit donc être réalisée afin de déterminer le respect des émissions.

Dans l'optique de l'utilisation du modèle pour faire la conception d'un procédé industriel ou pour modéliser un réacteur industriel, plusieurs étapes restent encore à franchir. Les points suivants doivent être considérés dans l'extrapolation du modèle à l'échelle industrielle et pour toute nouvelle recherche sur la gazéification :

- Modéliser la variation de la taille des particules en fonction de la température ;
- Prendre en compte le taux d'élutriation ;
- Prendre en compte les échanges de chaleur lit/particules ;
- Intégrer le modèle « *Core-exposed* » pour mieux prendre en compte les réactions hétérogènes ;
- Modéliser la variation de la taille des particules dans le lit ;
- Prendre en compte le bilan d'énergie et les échanges d'énergie avec l'environnement ;
- Intégrer le modèle dans Aspen ;
- Investiguer davantage les cinétiques de réaction du monoxyde de carbone et de la combustion de l'hydrogène ;
- Intégrer les cinétiques de réaction pour les NO_x et SO_x ;
- Intégrer les cinétiques de réaction pour les sorbants (dolomite, etc.)

Bibliographie

1. *Rapports d'évaluation du groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat.* .
2. *Rapport GEO-4*
http://www.unep.org/geo/geo4/report/GEO-4_Report_Full_en2.pdf
3. *Partenariat Asie-Pacifique sur le développement propre et le climat entre : États-Unis, Canada, Inde, Japon, Chine, Corée du sud, Australie.* .
4. ; Available from: <http://www.gasificationtech.com/gasificationhistory.html>.
5. *Energy Information Administration.*
6. Knoef, H.E.M.S.a.H.A.M., *Small Scale Gasification Systems.*
7. Radmanesh, R., *Fluidized Bed Biomass Gasification*, in *Chemical Engineering* École Polytechnique de Montréal.
8. Basu, P., *Combustion and gasification in fluidized bed.* 2006: CRC Press.
9. Radmanesh, R., Chaouki, Jamal; Guy, Christophe *Biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor: Experiments and modeling.* ENVIRONMENTAL AND ENERGY ENGINEERING.
10. Xavier DEGLISE, A.D. *Bois Énergie.*
11. Skreiberg, D.Ø., *An introduction to heating values, energy quality, efficiency, fuel and ash analysis and environmental aspects.* , Faculty of Technology, Makerere University (2005).
12. *Department for Business, Enterprise and Regulatory Reform (UK).* .
13. Sherbrooke, E.C.E.T.I.e.U.d. *La valorisation de résidus solides (urbains et ICI) et de résidus à haute teneur en eau (boues biologiques et boues d'abattoir): nouvelles stratégies.*
14. Bridgwater, A.V., *Pyrolysis and Gasification of Biomass and Waste.* 2003: CPL Press

15. Beenackers, A.A.C.M., *Biomass gasification in moving beds: A review of European Technology*. Renewable Energy, 1999. **16**: p. 1180-1186.
16. Laurent Van de Steene, G.P., Cirad-Fôret, *Le point sur la gazéification de la biomasse*.
17. Santos, D.S., *Solid Fuels Combustion and Gasification - Modeling, Simulation and Equipment Operation*
18. X. T. Li, J.R.G., C. J. Lim, A. P. Watkinson, H. P. Chen, J. R. Kim, *Biomass gasification in a circulating fluidized bed Biomass and Bioenergy*. 2004. **26**(2): p. 171-193.
19. S. Jarungthammachote, A.D., *Equilibrium modeling of gasification: Gibbs free energy minimization approach and its application to spouted bed and spout-fluid bed gasifiers*. Energy Conversion and Management. **49**(6): p. 1345-1356.
20. *Simulation of biomass gasification in fluidized bed reactor using ASPEN PLUS*. BIOMASS AND BIOENERGY 2008. **32**: p. 1245-1254.
21. Bacon DW, D.J., Hsu JC, Peters J. , *Modeling of fluidized bed gasifiers*. In: Milne TA. Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion, 1985: p. 717-732.
22. M. Ruggiero, G.M., *An equilibrium model for biomass gasification processes* Renewable Energy. 1999. **16**(1-4): p. 1106-1109.
23. Mansaray KG, A.-T.A., Ghaly AE, Hamdullahpur F, Ugursal VI. , *Mathematical modeling of a fluidized bed rice husk gasifier: Part I-Model development*. Energy Sources, 2000. **22**: p. 83-98.
24. D.A. Nemtsov, A.Z., *Mathematical modelling and simulation approaches of agricultural residues air gasification in a bubbling fluidized bed reactor*. Chemical Engineering Journal. **144**3(1-3): p. Pages 10-31.
25. Peijun Ji, W.F., Biaohua Chen, *Production of ultrapure hydrogen from biomass gasification with air* Chemical Engineering Science. **64**(3): p. 582-592.
26. F. Chejne, J.P.H., *Modelling and simulation of coal gasification process in fluidised bed Fuel*. **81**(13): p. 1687-1702

27. Manuel Campoy, A.G.-B., Fernando B. Vidal, Pedro Ollero, *Air-steam gasification of biomass in a fluidised bed: Process optimisation by enriched air*. Fuel Processing Technology. **90**(5): p. 677-685.
28. Afsin Gungor, N.E., *Two-dimensional coal combustion modeling of CFB*, International Journal of Thermal Sciences. **47**(2): p. 157-174.
29. Xiaofang Wang, B.J., Wenqi Zhong, *Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification*. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. **48**(2): p. 695-705.
30. *Numerical simulation of coal gasification at circulating fluidised bed conditions*. Fuel Processing Technology 2007. **88**: p. 948-958.
31. *Three-dimensional next term non-linear numerical analysis on the oxygen concentration field in underground coal previous gasification*.
32. *Three-dimensional modeling of a circulating fluidized bed gasifier for sewage sludge*. Chemical Engineering Science 2005. **60**: p. 4469 - 4484.
33. *Euler-Lagrange/DEM simulation of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor*. Particuology, 2009. **7**: p. 307-316
34. Buekens AG, S.J., *Modelling of biomass gasification*. Fundamentals of thermochemical biomass conversion: p. 619-689.
35. Kunii, D., Levenspiel, O. , *Fluidization Engineering*, ed. J. Wiley. 1991, New York.
36. K. Kato, C.Y.W., *Bubble assemblage model for fluidized bed catalytic reactors*. Chem. Eng. Sci. , 1969. **24** p. 1351-1369.
37. Souza-Santos, d., *Comprehensive Modelling and Simulation of Fluidized-Bed Boilers and Gasifiers*. Fuel, 1989. **68**(1507-1521).
38. *Two phase biomass air-steam gasification model for fluidized bed reactors: Part I-model development*.
39. Daniele Fiaschi, M.M., *A two-phase one-dimensional biomass gasification kinetics model* Biomass and Bioenergy. **21**(2): p. 121-132.

40. Souza-Santos, M.L.d., *A new version of CSFB, comprehensive simulator for fluidised bed equipment* *Fuel*. **86**(12-13): p. 1684-1709.
41. S. Hamel, W.K., *Modelling and simulation of bubbling fluidized bed gasification reactors*. *Fuel Energy Abstr.*, 2002. **43**: p. 250-1250.
42. Souza-Santos, M.L.d., *CSFB applied to fluidized-bed gasification of special fuels*. *Fuel*. **88**(5): p. 826-833.
43. J. Corella, J.H., J.M. Toledo, J.I. Gomez-Ciñvicos, in *FirstWorld Conference on Biomass for Energy and Industry*. 2001. p. 1971-1975.
44. Di Blasi, C., *Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars* *Progress in Energy and Combustion Science*. **35**(2): p. 121-140.
45. H. Jiang, R.V.M., *Anumerical model of a fluidized bed biomass gasifier*. *Biomass Bioenergy* 1992. **3**: p. 431-447.
46. Hajaligo, M.R., Howard, J.B., Longwell, J.P., Peters, W.A., *Product compositions and kinetics for rapid pyrolysis of cellulose*. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development* 1982. **21**: p. 457-465.
47. TB, R., *Biomass gasication-principles and technology*. 1981, Park Ridge, New Jersey: USA: Noyes Data Corporation.
48. Wang Y, K.C., *Kinetic model of biomass gasication*. *Solar Energy* 1993. **51**: p. 19-25.
49. May, W.G., *Fluidized bed reactor studies*. *Chemical Engineering Progress*. **55**(12): p. 49-56.
50. J. C. Abanades, G.G., *An extended version of the countercurrent backmixing model suitable for solid mixing in two-dimensional fluidised beds*. *Powder Technology*. **120**(1-2): p. 113-119.
51. Radmanesh, R., *Effect of Temperature on Solids Mixing in a Bubbling Fluidized Bed Reactor*. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 2005. **Vol 3**(article A16).
52. van Deemter, J.J. *The countercurrent flow model of a gas-solids fluidized bed*. in *International symposium on fluidization*. 1967: Netherland university press.

53. Soo, S.L., *Average Circulatory Motion of Particles in Fluidized Beds*. Power Technology, 1989. **57**: p. 107-117.
54. Peijun Ji, W.F., Biaohua Chen *Production of ultrapure hydrogen from biomass gasification with air*. Engineering Science, 2009. **64**.
55. Callaghan, C.A., *Kinetics and Catalysis of the Water-Gas-Shift Reaction: A Microkinetic and Graph Theoretic Approach.*, WORCESTER POLYTECHNIC INSTITUTE.
56. Xifeng Zhu, R.V., *A correlation between stoichiometrical ratio of fuel and its higher heating value*. Fuel 2005. **84**: p. 1007-1010.
57. D., V.C., *From biomass to diesel-technical and economic evaluation: biomass conversion to diesel by pyrolysis, gasification and Fischer-Tropsch.* . 2002, University of Twente.
58. S.A. Channiwala, P.P.P., *A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels*. Fuel 2002. **81** p. 1051-1063.
59. M.S. Rao, S.P.S., M.S. Sodha, A.K. Dubey, M. Shyam, *Stoichiometric, mass, energy and exergy balance analysis of countercurrent fixed-bed gasification of post-consumer residues*. BIOMASS AND BIOENERGY, 2004. **27**: p. 155-171.
60. Walawender WP, C.C., Fan LT. , *Operating parameters in Luencing downdraft gasifier performance.*, in *Energy from biomass and wastes*, K. DL, Editor. 1988. p. 411-45.
61. Bacacicoa PG, B.R., Arauzo J, Salvador ML, *Scale-up of downdraft moving bed gasifiers (25-300 kg=h)-design, experimental aspects and results*. Bioresource Technology 1994. **48**: p. 229-35.
62. Maschio G, L.A., Stoppato G. , *Production of syngas from biomass*. Bioresource Technology 1994. **48**: p. 119-26.
63. Davidson, J.F., Harrison, D. (1963). , *Fluidized Particles.* : Cambridge: University Press.

64. Grace, J.R., *Handbook of Multiphase Systems*, ed. G. Hetsroni, ed. Washington, D.C.: Hemisphere. 1982.
65. Babu, S.P., Shah, B., Talwalkar, A. , *Fluidization Correlations for Coal Gasification Materials-Minimum Fluidization Velocity and Fluidization Bed Expansion Ratio*, in *AIChE Symposium Series*. 1978. p. 176-186.
66. Bird et al., R.B.B., W.E. Stewart and E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena (second ed)*. 2002, New York Wiley.
67. Basu, P., *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*.
68. Abrahamsen, A.R.a.G., D., *Powder Technology*, 1980. **26**(35).
69. ML, D.S.-S., *Modelling and simulations of fluidized-bed boilers and gasifiers for caboneaceous solid*, in *Department of Chemical Engineering and fuel Technology*. 1987, University of Heffield,UK.
70. Darton RC, L.R., Davinson JF, Harrison, Trnas I Chem 1977. **55** (274).
71. Mori, S.a.W., D. Y., AICE J., 1975. **21**(109).
72. Wen, C.Y., Yu, Y.H. , *AIChE J.* , 1966. **12**: p. 610-612.
73. Sit, S.P., Grace, J.R. (1981). , *Effect of Bubble Interaction on the Interphase Mass Transfer in Gas Fluidized Beds*. *Chem. Engineering Science*. **36**: p. 327-335.
74. A.M.C. Janse, H.G.d.J., W. Prins and W.P.M. van Swaaij , *The combustion kinetics of char obtained by flash pyrolysis of pine wood*. *Ind Eng Chem Res* 1998. **37** p. 3909-3918.
75. Nandi SP, O.M., *Gasification of chars obtained from maple and jack pine woods*. *Fundamentals of biomass thermochemical conversion*. 1985: London: Elsevier. 567-87.
76. Van Den Aarsen FG, B.A., Van Swaaij WPM, *Wood pyrolysis and carbon dioxide char gasification kinetics in a fluidized bed*. *Fundamentals of biomass thermochemical conversion*, 1985.: p. 691–715.

77. Kurkela, E.S., P.; Laatikainen, L.; Simell, P. *Development of Simplified IGCCs Process for Biofuels Supporting Gasification Research at VTT*. in *Seminar on Power Production from Biomass*. Espoo, Finland.
78. Siminski, V.J., Wright, F.J., Edelman, R.B., Economos, C., Fortune, O.F. , *Research on Methods of Improving the Combustion Characteristics of Liquid Hydrocarbon Fuels*. . 1972, Air Force Aeropropulsion Lab., Wright Patterson Air Force Base, Ohio, U.S.A.
79. Hajaligol MR, H.J., Longwell JP, Peters WA. , *Product compositions and kinetics for rapid pyrolysis of cellulose*. *Ind Eng Chem Process Des Dev.* , 1982. **21**: p. 457-465.
80. Jess, A., *Reaktionen kinetische Untersuchungen zur thermischen Zersetzung von Modellkohlenwasserstoffen*. *Erdöl Erdgas Kohle* 1995. **111**: p. 479-484.
81. Lim, K.S.G., V. S.; Agarwal, P. K., , *Mixing of homogenous solids in bubbling fluidized beds: theoretical modelling and experimental investigation using digital image analysis*. *Chem. Eng. Sci.*, 1995. **48**(12): p. 2251-2265
82. Lim, K.S.Z., J. X.; Grace, J. R., *Hydrodynamics of gas-solid fluidization*. *International Journal of Multiphase Flow*, 1995. **21**: p. 141-193
83. Hoffmann, A.C.J., P. B. M., Prins, J. , *Particle Segregation in fluidized binary mixtures*. *Chem. Eng. Sci.*, 1993. **48**(9): p. 1583-1993
84. Narvaez, O., A., Aznar, M.P., Corella, J., *gasification with air in an atmospheric bubbling fluidized bed. Effect of six operational variables on the quality of the produce draw gas*. . *Industrial & Engineering Chemistry Research* 1996. **35**: p. 2110-2120.
85. Maniatis, K., Vassilatos, V., Kyritsis, S., *Design of a pilot plant fluidized bed gasifier*. *Advances in Thermochemical Biomass conversion*, 1994. **1**: p. 403-410.
86. Gulyurtlu, I., Franco, C., Mascarenhas, F., Cabrita I., *Steam gasification versus pyrolysis to produce medium calorific value gaseous fuel*. *Advances in Thermochemical Biomass Conversion*, 1994. **1**.

87. H. Zhou, A.D.J., P. Glarborg, P.A. Jensen, A. Kavaliauskas, *Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed*. Fuel, 2005. **84**: p. 389-403.
88. Bryden KM, R.K., *Numerical modeling of deep fixed bed combustor*. Energy Fuel, 1996. **10**(269).
89. Ekstrom, R.a., *Fuel gas from municipal waste in an integrated circulating fluidized bed/gas cleaning processes*. Energy Biomass Wastes, 1989. **12**: p. 811-906.
90. Czernik, S., Koeberle, P.G., Jollez, P., Bilodeau, J.F., Chornet, E., *Gasification of residual biomass via the biosyn fluidized bed technology*. Advances in Thermochemical Biomass Conversion, 1994. **1**: p. 423-437.
91. Pettyjohn, E.S.C., E.B. , *Effect of particle shape on free-settling rates of isometric particles*. Chemical Engineering Progress. **44**(2): p. 157-172.
92. Ganser, G.H., *A rational approach to drag prediction of spherical and non-spherical particles*. Powder Technol., 1993. **77**(143).
93. James MacDonald, D.O.A.a.A., University of Delaware. *The advection equation.*; Available from:
<http://www.physics.udel.edu/~jim/Advection/advection.pdf>.

Annexe 1 : Calcul de la vitesse terminale d'une particule

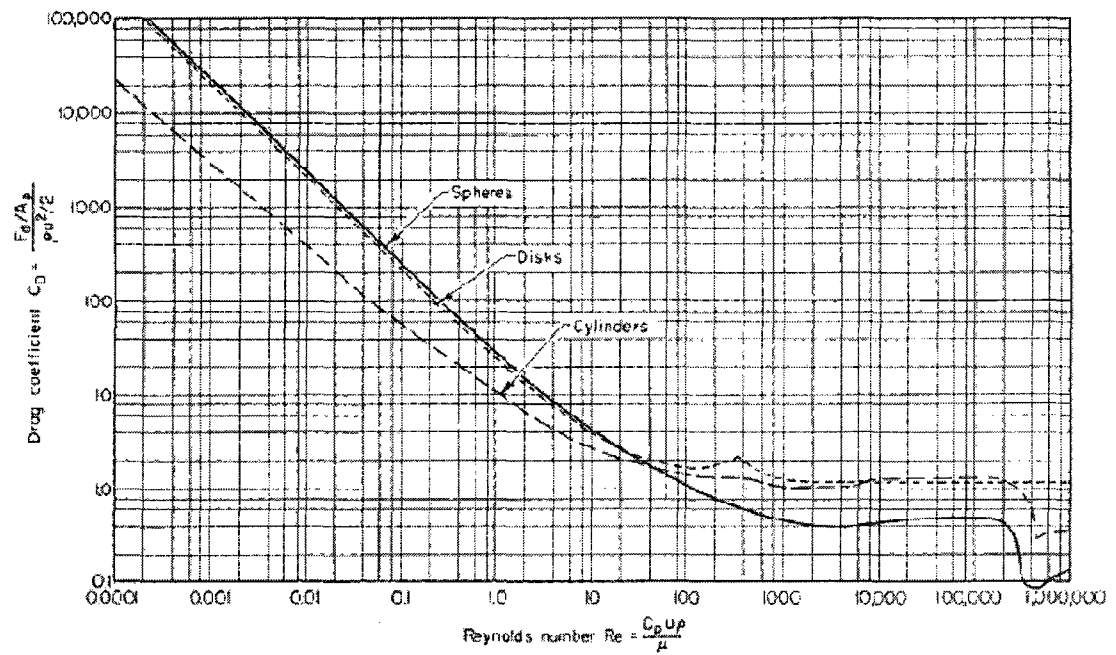
Le calcul de la vitesse terminale des particules est important puisque celui-ci permet de déterminer, pour une morphologie de particules donnée, la vitesse superficielle maximale du gaz au-delà de laquelle les particules seront entraînées avec le gaz et donc que celles-ci seront éjectées du réacteur.

Force de traînée

La force exercée par le fluide circulant autour de l'obstacle est proportionnel à un coefficient de trainé, à la surface apparente de la particule ainsi qu'à l'énergie cinétique du fluide :

$$F_D = C_D \frac{\pi d_p^2}{4} \left(\frac{\rho_g \|u\| u}{2} \right)$$

Le graphique suivant permet de trouver la valeur pour un nombre de Reynolds donné.



Coefficients de traînée pour des sphères, disques et cylindres [8].

La vitesse terminale de la particule est obtenue par le bilan des forces sur la particule :

Force de gravitation = poussée d'Archimède + force de traînée

$$m_p g = m_p \frac{\rho_g g}{\rho_p} + C_D \frac{\pi U_T^2 \rho_g d_p^2}{8}$$

Le coefficient d'Archimède est donné par :

$$Ar = \frac{\rho_g (\rho_p - \rho_g) g d_p^3}{\mu_g^2}$$

En introduisant la relation précédente dans le bilan de force et en isolant le coefficient

d'Archimède, on obtient :

$$Ar = \frac{3}{4} C_D \left[\frac{d_p U_T \rho_g}{\mu} \right]^2$$

Ainsi, la vitesse terminale est donnée par:

$$U_T = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{Ar}{C_D} \frac{\mu}{d_p \rho_g}}$$

Le coefficient de traînée, pour des particules quasi-sphériques peut-être approximé par la relation suivante :

$$C_D = \frac{a_1}{Re^{b_1}}$$

Les coefficients suivants sont utilisés:

Intervalle	Région	a_1	b_1
$0 < Re < 0.4$	Loi de Stokes	24	1.0
$0.4 < Re < 500$	Régime intermédiaire	10	0.5
$Re > 500$	Loi de Newton	0.43	0.0

Ainsi, les vitesses terminales s'écrivent :

$$U_T = \frac{g d_p^2 (\rho_p - \rho_g)}{18 \mu_g}, \quad 0 < Re < 0.4$$

$$U_T = \left[\frac{g d_p^{1.6} (\rho_p - \rho_g)}{13.9 \rho_g^{0.4} \mu_g^{0.6}} \right]^{0.71}, \quad 0.4 < Re < 500$$

$$U_T = \left[\frac{3.03 g d_p (\rho_p - \rho_g)}{\rho_g} \right]^{0.5}, \quad Re > 500$$

Le nombre de Reynolds est défini par :

$$Re = \frac{d_p \rho_g U}{\mu_g}$$

Pour les particules non-sphériques, bien que le diamètre apparent puisse être le même, la force de traînée est différente. De plus, il est nécessaire de connaître l'orientation de la particule afin de pouvoir déterminer la force de traînée. Pour des nombres Reynold inférieurs à 200, la particule est orientée de façon stable dans la direction du maximum de poussée. Un facteur de correction K_t valide pour l'intervalle $0.670 < \phi < 0.906$ doit donc être apporté aux équations précédentes afin de prendre en compte la non-sphéricité de la particule [91].

$$U_t = K_t U_t$$

Où :

$$K_t = 0.843 \log_{10} \left[\frac{\phi}{0.065} \right] \quad , Re < 0.2$$

$$K_t = \left[\frac{4(\rho_p - \rho_g) g d_p}{3 \rho_g (5.31 - 4.88 \phi)} \right] \quad , Re > 500$$

Où d_v est le diamètre d'une sphère de même volume. Le paramètre K_t est extrapolé pour les valeurs de $0.2 < Re < 500$.

Une autre approche consiste à utiliser la relation de Ganser (1993) [92] qui donne la valeur de C_D en prenant en compte un spectre plus large de sphéricités. Cette dernière permet de déterminer avec une meilleure précision la vitesse terminale.

Annexe 2 : Exemple de calcul

Exemple de calcul

Le bilan molaire pour l'élément dz s'écrit :

$$\text{Accumulation} = \begin{array}{c} \text{Échange} \\ \text{Bulles} \leftrightarrow \text{Émulsion} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Réactions} \\ \text{gaz-gaz} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Réactions} \\ \text{gaz-solide} \end{array}$$

Par exemple, en utilisant les équations 72 et 73, le bilan s'écrit pour le carbone le dioxyde de carbone (CO_2):

Phase bulle :

$$\frac{dF_{\text{CO}_2,b}}{dV} = \varepsilon_b (v_{\text{CO}_2,4} R_4 + v_{\text{CO}_2,5} R_5 + v_{\text{CO}_2,7} R_7 + v_{\text{CO}_2,8} R_8 + v_{\text{CO}_2,9} R_9) + \varepsilon_b K_{be} C_T (y_{\text{CO}_2,e} - y_{\text{CO}_2,b})$$

Phase émulsion :

$$\begin{aligned} \frac{dF_{\text{CO}_2,b}}{dV} = & (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_e)(v_{\text{CO}_2,1} R_1 + v_{\text{CO}_2,3} R_3) + \varepsilon_e(1 - \varepsilon_b)(v_{\text{CO}_2,4} R_4 + v_{\text{CO}_2,5} R_5 + v_{\text{CO}_2,7} R_7 + v_{\text{CO}_2,8} R_8 + v_{\text{CO}_2,9} R_9) \\ & + \varepsilon_b K_{be} C_T (y_{\text{CO}_2,b} - y_{\text{CO}_2,e}) \end{aligned}$$

Le même raisonnement s'applique aux autres éléments.

Annexe 3 : Mélange de la phase solide : résolution du système d'équation pour le modèle CCBM

L'équation à résoudre est une équation appelée équation d'advection. Cette classe particulière d'équation hyperbolique est un problème de Riemann. La méthode numérique de résolution de ce problème de dynamique des fluides a une incidence sur la stabilité de la solution. Ainsi, il s'avère que la méthode *FTCS* (Forward Time Centered Space) est hautement instable et implique une divergence de la solution [93]. Ainsi les fonctions standards de résolution dans Matlab ne peuvent pas être utilisées puisque celles-ci utilisent une méthode d'Euler pour résoudre les équations, laquelle donne des solutions instables et physiquement non observées. Un schéma de calcul de type upwind doit être utilisé car il y a propagation de l'information. Le problème à résoudre est le suivant :

$$q_t + q_x = \beta q$$

Un tel problème peut être séparé en deux sous problèmes indépendants :

$$\text{Problème A : } q_t + q_x = 0$$

$$\text{Problème B : } q_t = -\beta q$$

Chaque itération de calcul se résume donc à résoudre le problème A par une méthode upwind et le problème B par une méthode d'Euler :

$$Q_i^* = Q_i^n - \frac{u\Delta t}{\Delta x} (Q_i^n - Q_{i-1}^n)$$

$$Q_i^{n+1} = Q_i^* - \beta\Delta t Q_i^*$$

Ainsi la méthode de résolution revient à résoudre d'abord le changement de concentration et ensuite le déplacement de l'information. La figure A3.1 illustre le problème :

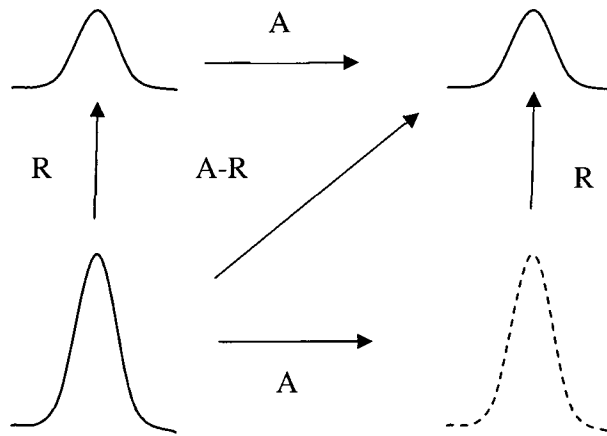


Figure A3.1: Illustration de la méthode de résolution de l'équation d'advection-réaction en deux étapes.

L'information contenue en bas à gauche advecte et réagit, tel qu'indiqué par la flèche diagonale A-R. Le même résultat peut être obtenu si l'information réagit et advecte par la suite ou si elle advecte et réagit par la suite.

Étant donné la présence de concentration ascendante et de concentration descendante, le système d'équation suivant doit être résolu :

$$Q_{i,1}^* = Q_i^n - \frac{u_1\Delta t}{\Delta x} (Q_i^n - Q_{i-1}^n)$$

$$Q_{i,2}^* = Q_i^n - \frac{u_2\Delta t}{\Delta x} (Q_i^n - Q_{i-1}^n)$$

$$Q_{i,1}^{n+1} = Q_{i,1}^* - \beta\Delta t Q_{i,1}^*$$

$$Q_{i,2}^{n+1} = Q_{i,2}^* - \beta\Delta t Q_{i,2}^*$$

Il est à noter que dans ce cas-ci, le terme β est le terme d'échange entre les deux phases.



Eucalyptus	17.82	81.42	0.76	49.00	5.87	43.97	0.30	0.01	19.42	19.46
Camaldulensis										
Casuarina	19.58	78.58	1.83	48.50	6.04	43.32	0.31	0.00	18.77	19.53
Poplar	16.35	82.32	1.33	48.45	5.85	43.69	0.47	0.01	19.38	19.26
Sudan Grass	18.60	72.75	8.65	44.58	5.35	39.18	1.21	0.01	17.39	17.62
PROCESSED										
BIOMASS										
Plywood	15.77	82.14	2.09	48.13	5.87	42.46	1.45	0.00	18.96	19.26
AGRICULTURAL										
Peach Pits	19.85	79.12	1.03	53.00	5.90	39.14	0.32	0.05	20.82	21.39
Walnut Shells	21.16	78.28	0.56	49.98	5.71	43.35	0.21	0.01	20.18	19.68
Almond	21.54	76.83	1.63	51.30	5.29	40.90	0.66	0.01	20.01	19.87
Prunings										
Black Walnut	18.56	80.69	0.78	49.80	5.82	43.25	0.22	0.01	19.83	19.75
Prunings										
Corn cobs	18.54	80.10	1.36	46.58	5.87	45.46	0.47	0.01	18.77	18.44
Wheat Straw	19.80	71.30	8.90	43.20	5.00	39.40	0.61	0.11	17.51	16.71
Cotton Stalk	22.43	70.89	6.68	43.64	5.81	43.87	0.00	0.00	18.26	17.40
Corn Stover	19.25	75.17	5.58	43.65	5.56	43.31	0.61	0.01	17.65	17.19
Sugarcane	14.95	73.78	11.27	44.80	5.35	39.55	0.38	0.01	17.33	17.61
Bagasse										
Rice Hulls	15.80	63.60	20.60	38.30	4.36	35.45	0.83	0.06	14.89	14.40
Pine needles	26.12	72.38	1.50	48.21	6.57	43.72			20.12	20.02
Cotton gin trash	15.10	67.30	17.60	39.59	5.26	36.38	2.09	0.00	16.42	15.85
AQUATIC										
BIOMASS										
Water Hyacinth (Florida)	-	80.40	19.60	40.30	4.60	33.99	1.51	0.00	14.86	15.54
Brown Kelp, Giant, Soquel Point	-	57.90	42.10	27.80	3.77	23.69	4.63	1.05	10.75	10.85
AVERAGE				47.91	5.74	40.98	0.52	0.05	19.11	19.15

LIQUID FUELS									
n-octane	0.00		0.00	84.10	15.90	0.00	0.00	0.00	47.80 48.09
Benzene, C ₆ H ₆	0.00			92.25	7.75	0.00	0.00	0.00	41.79 41.34
Motor Gasoline	0.00			85.50	14.40	0.00	0.00	0.10	46.88 46.83
Kerosene	0.00		0.01	85.80	14.10	0.00	0.00	0.10	46.50 46.58
Methanol, CH ₃ OH	0.00		0.00	37.50	12.50	50.00	0.00	0.00	22.69 22.65
Ethanol, C ₂ H ₅ OH	0.00		0.00	52.20	13.00	34.80	0.00	0.00	30.15 29.94
PYROLYSIS OILS									
LBL Wood Oil			0.78	72.30	8.60	17.60	0.20	0.01	33.70 33.53
BOM wood oil			0.66	82.00	8.80	9.20	0.60	0.00	36.80 38.02
Coke-oven tar			0.25	91.75	5.50	0.80	0.90	0.80	38.20 38.49
Low Temp Tar				83.00	8.20	7.40	0.60	0.80	38.75 37.94
SOLID FUELS									
Coal - Pittsburgh Seam	55.80	33.90	10.30	75.50	5.00	4.90	1.20	3.10	31.75 31.82
Peat, S-H3	26.87	70.13	3.00	54.81	5.38	35.81	0.89	0.11	22.00 21.70
Charcoal	89.31	93.88	1.02	92.04	2.45	2.96	0.53	1.00	34.39 34.78
Oak char (565C)	55.60	27.10	17.30	64.60	2.10	15.50	0.40	0.10	23.05 23.06
Casuarina Char (950C)	71.53	15.23	13.24	77.54	0.93	5.62	2.67	0.00	27.12 27.26
Coconut Shell Char (750C)	87.17	9393.00	2.90	88.95	0.73	6.04	1.38	0.00	31.12 31.21
Eucalyptus char (950C)	70.32	19.22	10.45	76.10	1.33	11.10	1.02	0.00	27.60 26.75
ORGANIC			M				cal/mo	cal/g	kJ/g
CHEMICALS									
Acetone;			58	62.07	10.34	27.59	428	7.38	30.9 31.01

(CH₃)₂CO								
Acetic Acid;	60	40.00	6.67	53.33	209	3.48	14.6	16.30
CH₃CO₂H								
D-Glucose;	180	40.00	6.67	53.33	670	3.72	15.6	16.30
C₆H₁₂O₆								
Phenol;	94	76.60	6.38	17.02	730	7.76	32.5	32.50
C₆H₅OH								
Cellulose;	162	44.44	6.17	49.38				17.68
C₆H₁₀O₅								
Lignin		63.8	6.30	29.90				26.60
(Softwood)								
Lignin		59.8	6.40	33.70				24.93
(Hardwood)								
EXCEPTIONS								
Hydrogen, H₂								
		0.00	100.00	0.00	0.00	0.00	141.26	117.83
Carbon								
		42.86	0.00	57.14	0.00	0.00	10.16	9.05
Monoxide, CO								
Acetylene								
		92.25	7.75	0.00	0.00	0.00	49.60	41.34
Carbon								
		100.00	0.00	0.00			32.81	34.91
Carbon								
		27.27	0.00	72.7%			0.00	9.45
dioxide, CO₂								
Water								
		0.00	11.11	88.89			0.00	3.90

Annexe 5 : Caractéristiques des différents types de gazogènes

	Contre courant	Co-courant	Lit fluidisé à bulles	Lit fluidisé circulant
Sensibilité à :		spécifique	Flexible	Flexible
- Composition du combustible	**	***	*	*
- Grosseur des particules	****	*	**	**
- Humidité des particules				
Teneur en goudron			****	***
Température de réaction	1000 °C	1000 °C	850 °C	850 °C
Mélange du combustible	*	*	****	*****
Température des gaz de sortie	250 °C	800 °C	800 °C	850 °C
Présence de goudron dans les gaz	****	*	**	*
Présence de poussières dans les gaz	***	**	*****	*****
Potentiel de « scale up »	***	*	***	****
Facilité de démarrage	*	*	***	***
Facilité de contrôle	**	**	****	****
Conversion du carbone	****	****	**	****
Efficacité thermique	*****	****	***	****
Pouvoir calorifique nette	*	*	*	**

Annexe 6 : Préfacteurs en fonction de la température

